

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В НАНОПЛАСТИНКЕ CdSe С ПРИМЕСЯМИ

Д.А. БАГДАСАРЯН, А.А. НААПЕТЯН, В.А. АРУТЮНЯН, А.А. САРКИСЯН*

Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Ереван, Армения

*e-mail: hayk.sarkisyan@rau.am

(Поступила в редакцию 7 февраля 2024 г.)

Исследовано поведение электрона в коллоидной нанопластинке CdSe, содержащей примесные центры, при наличии аксиального магнитного поля. Вычисления проведены с учётом существенного скачка диэлектрической проницаемости в аксиальном направлении. Получено двумерное уравнение Шрёдингера с эффективным потенциалом взаимодействия электрона с примесными центрами, локализованными в центральной плоскости нанопластинки. Показано, что с увеличением числа примесей, влияние магнитного поля на уровни энергии электрона ослабевает.

1. Введение

Полупроводниковые нанопластинки (nanoplatelet — NPL) в последнее десятилетие стали предметом интенсивного изучения, так как обладают важными физическими характеристиками, позволяющими рассматривать эти системы в качестве функциональной базы полупроводниковых приборов нового поколения: светодиодов, солнечных элементов и т.д. [1–5]. Благодаря геометрическому совершенству ансамблей NPL спектр излучения и поглощения этих структур обладает малой полушириной, что делает их источниками оптического излучения различных цветов, обладающих большой четкостью [6, 7].

Простейшей моделью NPL является прямоугольный параллелепипед, одна из сторон которого значительно меньше двух других. На сегодняшний день реализованы коллоидные CdS, CdSe NPL, размеры которых колеблются в пределах от нескольких атомных слоев, в направлении сильного размерного квантования, до нескольких десятков атомных слоев, в направлениях слабого размерного квантования. Фактически NPL являются гибридными структурами, занимающими промежуточное положение между квантовыми ямами и квантовыми точками, при этом эффективное движение носителей заряда в таких системах можно считать двумерным, предполагая, что в направлении малой толщины NPL носители заряда находятся на основном уровне размерного квантования.

Для теоретического описания физических процессов в NPL необходимо дать математическую модель изучаемой структуры, учитывающую с одной стороны эффект квантового ограничения носителей заряда, а с другой — наличие существенного скачка диэлектрической проницаемости на границе перехода NPL–окружающая среда. Эффект скачка диэлектрической проницаемости может быть

учтен, в частности, путем введения изображения зарядов, что существенно влияет на характер кулоновского взаимодействия между носителями заряда в NPL: экситонов, примесей, трионов, биэкситонов и т. д. [8–11]. Ясно, что наличие примесных центров в NPL будет существенным образом отражаться на оптических характеристиках изучаемых образцов. Так, например, в работе [12] показано, что с увеличением концентрации примесей спектр поглощения (оптического излучения) смещался в коротковолновую область (синее смещение), что являлось прямым следствием влияния многопримесных центров на характер оптических переходов.

С теоретической точки зрения наиболее простой моделью, описывающей влияние большого количества примесных центров на поведение электронов, является модель электрона, совершающего движение в полях, создаваемых примесными центрами. Можно ожидать довольно интересное поведение энергетического спектра такого электрона в зависимости от характера распределения примесей в NPL [13] – от полного хаоса до полного порядка. Вместе с этим наличие внешнего воздействия, например, магнитного поля может являться дополнительным рычагом для управления энергетическим спектром электрона в вышеприведенной системе. Целью настоящей работы является исследование влияния магнитного поля на одноэлектронный спектр в NPL (CdSe), содержащей многопримесные центры.

2. Теория

В приближении эффективной массы одноэлектронный гамильтониан изучаемой системы (рис.1), будет иметь следующий вид:

$$\widehat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{r}_{\text{imp}(N)}) = \frac{1}{2\mu} \left(\widehat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) + V_{\text{self}}(\mathbf{r}) + V_{\text{imp-e}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{r}_{\text{imp}(N)}) \quad (1)$$

где \mathbf{A} — вектор-потенциал аксиального магнитного поля, $V_{\text{conf}}(\mathbf{r})$ — ограничивающий потенциал NPL, $V_{\text{self}}(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия, обусловленная наличием электростатических изображений электрона в NPL (поляризационные эффекты), $V_{\text{imp-e}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{r}_{\text{imp}(N)})$ — энергия взаимодействия электрона с примесными центрами, соответствующая заданной конфигурации примесей $\{\mathbf{r}_{\text{imp}(i)}\}$.

Для указанных выше энергий имеем следующие выражения [14]:

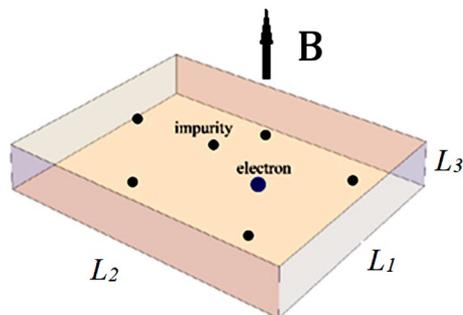


Рис.1. Схематический рисунок нанопластинки CdSe со сторонами $L_1 \times L_2 \times L_3$, содержащей примесные центры в плоскости $z = 0$.

$$V_{\text{conf}}(\mathbf{r}) = V_{\text{conf}}^{(1)}(z) + V_{\text{conf}}^{(2)}(x, y), \quad (2)$$

$$V_{\text{conf}}^{(1)}(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq L_3 / 2 \\ V_0, & |z| > L_3 / 2, \end{cases} \quad (3)$$

$$V_{\text{conf}}^{(2)}(x, y) = \begin{cases} 0, & |x| \leq L_1 / 2, |y| \leq L_2 / 2 \\ \infty, & |x| > L_1 / 2, |y| > L_2 / 2, \end{cases} \quad (4)$$

$$V_{\text{e-imp}}(\mathbf{p}, z; \mathbf{p}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{p}_{\text{imp}(N)}) = - \sum_{i=1}^N \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \frac{k^{|m|} q_{\text{imp}} e}{\varepsilon_1 \sqrt{(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{\text{imp}(i)})^2 + (z + mL_3)^2}}, \quad (5)$$

где учтено, что все примеси находятся в плоскости $z=0$ [14], $k = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) / (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)$, $\varepsilon_1 = 6$ — диэлектрическая постоянная NPL, $\varepsilon_2 = 2$ — диэлектрическая постоянная окружающей среды.

Потенциальная энергия электрона, обусловленная мнимыми электронными зарядами, имеет следующий вид [14]:

$$V_{\text{self}}(z) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{k^{|m|} e^2}{2\varepsilon_1 |z - (-1)^m z + mL_3|}, \quad |z| \leq L_3 / 2, \quad (6)$$

$$V_{\text{self}}(z) = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{k^{2m+1} e^2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) |2z + (2m+1)L_3|} - \frac{ke^2}{2\varepsilon_2 |2z - L_3|}, \quad |z| > L_3 / 2, \quad (7)$$

$$V_{\text{self}}(z) = V_{\text{self}}(-z), \quad z < -L_3 / 2, \quad (8)$$

В вышеприведенных формулах учитываются только изображения зарядов в направлении z , так как латеральные размеры L_1 и L_2 намного больше L_3 , что позволяет пренебречь боковыми эффектами электростатического изображения.

Выбирая калибровку векторного потенциала в виде:

$$\mathbf{A} = \left\{ A_x = -\frac{By}{2}, A_y = \frac{Bx}{2}, A_z = 0 \right\}. \quad (9)$$

для магнитной части гамильтониана $\widehat{H}_{\text{magn}}$ получим:

$$\widehat{H}_{\text{magn}} = \frac{i\hbar\omega_H}{2} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\mu\omega_H^2 (x^2 + y^2)}{8}, \quad (10)$$

где $\omega_H = |e|B / \mu c$ — циклотронная частота электрона.

Из рис. 2 следует, что учёт скачка диэлектрических проницаемостей ε_1 и ε_2 приводит к сглаживанию профиля прямоугольного потенциала, а также к уменьшению высоты потенциала ограничения V_0 . Отметим, что вычисления произведены для структуры CdSe со следующими материальными параметрами: $\mu_c = 0.12m_0$ — эффективная масса электрона, где m_0 — масса свободного электрона, $a^*_B = \hbar^2\varepsilon / \mu e^2 = 4.25$ нм — эффективный радиус Бора для электрона и $R^* = \mu e^4 / 2\hbar^2\varepsilon^2 = 18.01$ мэВ — эффективная энергия Ридберга.

Поставленную задачу будем решать с учётом специфической геометрии NPL. Для этого заметим, что можно выделить аксиальную часть задачи, считая

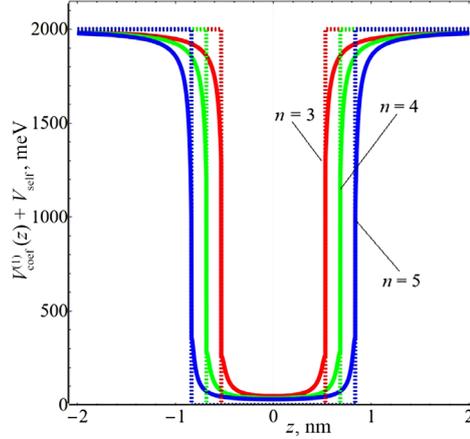


Рис.2. Профиль суммарного потенциала $V_{\text{conf}}^{(1)}(z) + V_{\text{self}}(z) = V_{\text{total}}(z)$. Здесь n есть число монослоев.

движение электрона в этом направлении значительно более быстрым, чем в плоскости XOY . Для этого представим волновую функцию электрона в виде произведения

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_1(z)\psi_2(x, y), \quad (11)$$

где $\psi_1(z)$ является решением уравнения

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu_{zc}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{conf}}^{(1)}(z) + V_{\text{self}}(z) \right\} \psi_1(z) = E_z \psi_1(z). \quad (12)$$

Далее, усредняя индивидуальные потенциалы электрон–примесного взаимодействия по волновым функциям $\psi_1(z)$

$$V_{\text{e-imp}(i)}^{\text{ind}}(\mathbf{p}; \mathbf{p}_{\text{imp}(i)}) = \int_{-L/2}^{+L/2} \psi_1^*(z) V_{\text{e-imp}(i)}^{\text{ind}}(\mathbf{p}, z; \mathbf{p}_{\text{imp}(i)}) \psi_1(z) dz, \quad (13)$$

для двумерной потенциальной энергии, создаваемой всеми N примесями данной конфигурации, в плоскости XOY получим

$$V_{\text{e-imp}}^{\text{eff}}(\mathbf{p}; \mathbf{p}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{p}_{\text{imp}(N)}) = \sum_{i=1}^N \left\{ \int_{-L/2}^{+L/2} \psi_1^*(z) V_{\text{e-imp}(i)}^{\text{ind}}(\mathbf{p}, z; \mathbf{p}_{\text{imp}(i)}) \psi_1(z) dz \right\}. \quad (14)$$

Таким образом, для двумерной волновой функции $\psi_2(x, y)$ получим следующее уравнение

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_{\text{conf}}^{(2)}(x, y) \right] \psi_2(x, y) + \widehat{H}_{\text{magn}} \psi_2(x, y) + V_{\text{e-imp}}^{\text{eff}}(\mathbf{p}; \mathbf{p}_{\text{imp}(1)}, \dots, \mathbf{p}_{\text{imp}(N)}) \psi_2(x, y) = E^{2D}(B) \psi_2(x, y). \quad (15)$$

Решение уравнения (15) находится на основе численного моделирования с помощью метода конечных элементов применительно к плоскости XOY . При этом используется треугольная ячейка для дискретизации прямоугольника размером $L_1 \times L_2$.

3. Обсуждение результатов

Сразу отметим, что учёт скачка диэлектрической проницаемости приводит к увеличению энергии взаимодействия электрона с примесными центрами. На рис.3 изображены зависимости энергий $V_{e-imp}^{ind}(\rho)$ в случае, когда присутствует эффект диэлектрического ограничения (кривая 1) и в случае, когда скачок диэлектрической проницаемости не учтён (кривая 2). Как следует из этого рисунка, учёт диэлектрического скачка приводит к существенному увеличению энергии связи электрона с примесным центром, при этом потенциал увеличивает также своё дальноедействие.

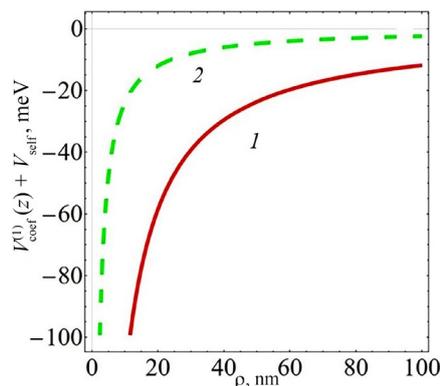


Рис.3. Зависимость $V_{e-imp}^{ind}(\rho)$ (1) в случае, когда учитывается эффект скачка диэлектрических проницаемостей и (2) в случае, когда этот скачок не учтён.

На рис.4а, б представлены трёхмерные зависимости потенциалов взаимодействия электрона с примесными центрами, распределёнными в плоскости XOY (рис.5а, б) в случае, когда учитывается скачок ϵ (рис.4а и рис.5а), и когда эффект диэлектрического ограничения не учитывается (рис.4б и рис.5б).

Из приведённых рисунков следует, что потенциальная яма, возникающая благодаря взаимодействию электрона с примесным центром, глубже в случае учёта эффекта диэлектрического ограничения. При этом сравнение рис.5а с рис.5б показывает, что учёт скачка ϵ приводит к более существенной локализации электрона вокруг конкретного примесного центра. Как следствие, эффект перекрытия волновых функций электрона относящихся к соседним примесям

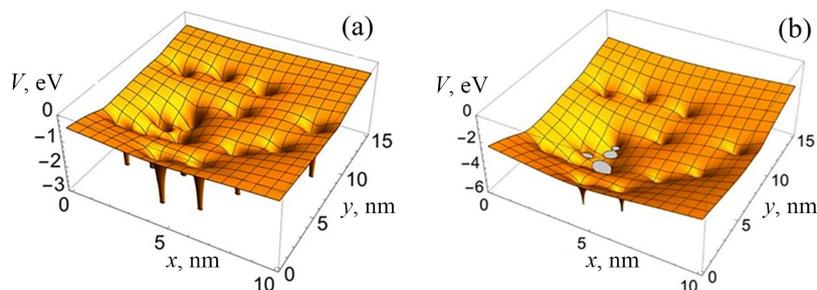


Рис.4. Трёхмерные зависимости $V_{imp}^{eff}(x, y)$ (а) в случае, когда учитывается скачок диэлектрических проницаемостей ϵ , и (б), когда скачок ϵ не учитывается.

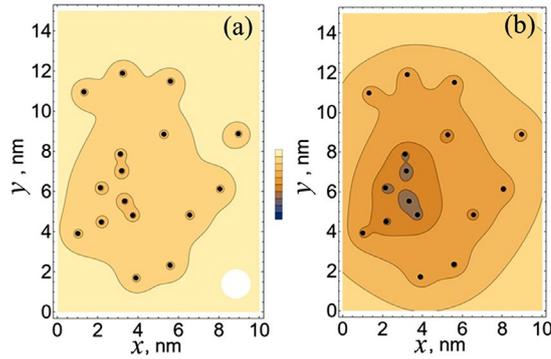


Рис.5. Распределение потенциалов примесей (a) в случае, когда учитывается эффект диэлектрического ограничения, и (b) в случае, когда не учитывается.

ослабевает. Индивидуальные потенциальные энергии электрон-примесного взаимодействия имеют более существенное влияние в случае учёта эффекта диэлектрического ограничения. Отметим также, что на рис.5 представлены распределения потенциалов примесей в случае учёта скачка ϵ (рис.5a) и без учёта данного скачка (рис.5b).

На рис.6a, b представлены зависимости разности энергий электрона в поле примесных центров при наличии магнитного поля и в его отсутствие:

$$E^{2D}(B) - E^{2D}(0) = \Delta E^{2D}(B), \quad (16)$$

в случае одного примесного центра $N = 1$, и при наличии $N = 10$ примесей.

Сразу отметим, что в случае одной примеси зависимость $\Delta E^{2D}(B)$ имеет близкий к симметрии характер поведения для различных направлений вращения примесного электрона. При этом нумерация энергетических уровней вводится в отсутствие магнитного поля по мере возрастания энергий с помощью квантового числа $n_{xy} = 1, 2, \dots$. С увеличением числа примесей влияние магнитного поля на электронные состояния начинает ослабевать, так как число притягивающих центров увеличивается и, как следствие, зависимость $\Delta E^{2D}(B)$ от величины магнитного поля становится более слабо выраженной, при этом асимметрия относительно прямой $\Delta E^{2D}(B) = 0$ становится более выраженной. Отметим также, что с увеличением B зависимость $\Delta E^{2D}(B)$ приближается к линейной. Это

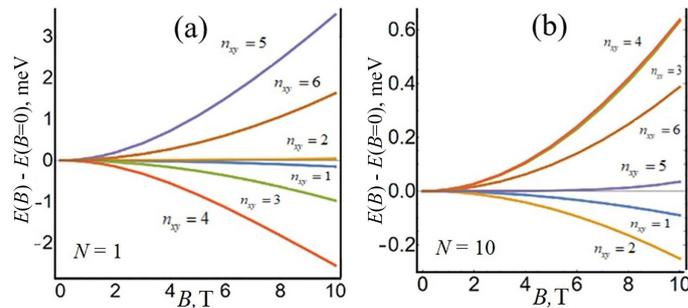


Рис.6. Зависимости энергий $\Delta E^{2D}(B)$ от величины магнитного поля B (a) в случае одной примеси и (b) в случае, когда число примесей $N = 10$.

объясняется тем, что уровни энергии электрона в магнитном поле в случае отсутствия примесей линейным образом зависят от величины магнитного поля (уровни Ландау). При этом, как следует из рис.ба, с ростом магнитного поля разность $\Delta E^{2D}(B)$ для уровня $V_{\text{conf}}^{(1)}(z) + V_{\text{self}}(z)$ меняется медленнее по сравнению с уровнем $n_{xy} = 5$, чем и объясняется смена местами кривых $\Delta E^{2D}(B)$ для уровней $n_{xy} = 6$ и $n_{xy} = 5$. В случае, когда число примесей $N = 10$, вышеуказанный эффект с увеличением магнитного поля становится более выраженным. Это является проявлением крайне сложного характера поведения одноэлектронных состояний в результирующем поле примесей. К сожалению, выявить закономерности перераспределения уровней с ростом магнитного поля не удастся в связи со сложностью изучаемой системы. Однако следует отметить, что с ростом магнитного поля подобное поведение характерно для различных систем, ярким примером чего являются осцилляции основного уровня энергии двумерного ротатора в магнитном поле (эффект Ааронова–Бома для связанных состояний) [15].

4. Заключение

В работе исследовалось поведение электрона в поле примесных центров, локализованных в нанопластинке CdSe, при наличии аксиального магнитного поля. Учёт скачка диэлектрической проницаемости на границе перехода нанопластинка—окружающая среда в аксиальном направлении приводит к существенному усилению взаимодействия электрона с отдельно взятым примесным центром.

Выявлен сложный характер зависимости энергетических уровней электрона от величины магнитного поля. При этом показано, что с ростом числа примесей влияние магнитного поля на электронные уровни ослабевает.

Работа выполнена в рамках программы «Поддержка передовых научных исследований 21AG — 1C022» Комитета по высшему образованию и науке.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Kavan, J.H. Yum, M. Grätzel. ACS Nano, **5**, 165 (2011).
2. Y. Guo, F. Gao, P. Huang, R. Wu, W. Gu, J. Wei, F. Liu, H. Li. Energy Mater. Adv., **2022**, 9857943 (2022).
3. A.A. Kostanyan. J. Contemp. Phys., **42**, 107 (2007).
4. M. Jong Ju, I.Y. Jeon, J.Ch. Kim, K. Lim, H.J. Choi, S.M. Jung, I.T. Choi, Y.K. Eom, Y.J. Kwon, J. Ko, J.J. Lee, H.K. Kim, J.B. Baek. Adv. Mater., **26**, 3055 (2014).
5. Z. Chen, B. Nadal, B. Mahler, H. Aubin, B. Dubertret. Adv. Funct. Mater., **24**, 295 (2014).
6. J. Yu, R. Chen. Info Mat., **2**, 905 (2020).
7. R. Scott, J. Heckmann, A.V. Prudnikau, A. Antanovich, A. Mikhailov, N. Owschimikow, M. Artemyev, J.I. Climente, U. Woggon, N. B. Grosse, A.W. Achtstein. Nature Nanotech., **12**, 1155 (2017).
8. D.F. Macias-Pinilla, J. Planelles, I. Mora-Seró, J.I. Climente. J. Phys. Chem. C, **125**, 15614 (2021).
9. F.V. Antolinez, F.T. Rabouw, A.A. Rossinelli, R.C. Keitel, A. Cocina, M.A. Becker,

- D.J. Norris.** Nano Lett., **20**, 5814 (2020).
10. **D.F. Macias-Pinilla, J. Planelles, J.I. Climente.** Nanoscale, **14**, 8493 (2022).
11. **L. Peng, W. Cho, X. Zhang, D. Talapin, X. Ma.** Phys. Rev. Materials, **5**, L051601 (2021).
12. **V.A. Harutyunyan, H.A. Sarkisyan.** Nanomaterials, **12**, 3690 (2022).
13. **M. Dufour, E. Izquierdo, C. Livache, B. Martinez, M.G. Silly, T. Pons, E. Lhuillier, C. Delerue, S. Ithurria.** ACS Appl. Mater. Interfaces, **11**, 10128 (2019).
14. **T. Takagahara.** Phys. Rev. B, **47**, 4569 (1993).
15. **A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia, P.M. Petroff.** Phys. Rev. Lett., **84**, 2223 (2000).

ՄԱԳՆԻՍԿԱԿԱՆ ԴԱՇՏԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ ԷԼԵԿՏՐՈՆԱՑԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ՎՐԱ ԽԱՌՆՈՒԿՆԵՐՈՎ CdSe ՆԱՆՈՒԹԵՂՈՒՄ

Դ.Ա. ԲԱԴԴԱՍԱՐՅԱՆ, Ա.Ա. ՆԱՀԱՊԵՏՅԱՆ,
Վ.Ա. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Հ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Հետազոտվել է էլեկտրոնի վարքը կոլոիդալ CdSe, բազմախառնուկային կենտրոններ պարունակող նանոթիթեղում, արքիալ մագնիսական դաշտի առկայության պայմաններում: Հաշվարկները իրականացվել են հաշվի առնելով դիէլեկտրական թափանցելիության թռիչքաձև փոփոխությունը արքիալ ուղղությամբ: Ստացվել է էլեկտրոնի և նանոթիթեղի կենտրոնական հարթությունում տեղայնացված խառնուկային կենտրոնների փոխազդեցության էֆեկտիվ պոտենցիալը իր մեջ ներառող Շրյոդինգերի երկչափ հավասարումը: Ցույց է տրվել, որ խառնուկաների թվի աճին զուգընթաց մագնիսական դաշտի ազդեցությունը էլեկտրոնի էներգիական մակարդակների վրա թուլանում է:

INFLUENCE OF MAGNETIC FIELD ON THE ELECTRON STATES IN CdSe NANOPATELETS WITH IMPURITIES

D.A. BAGHDASARYAN, A.A. NAHAPETYAN,
V.A. HARUTYUNYAN, H.A. SARKISYAN

In the presence of the axial magnetic field, the behavior of the electron in the colloidal CdSe nanoplatelet containing multi-impurity centers has been investigated. The calculations have been carried out considering the essential jump of the dielectric constant in the axial direction. The two-dimensional Schrodinger equation with the effective potential of the interaction of electron and impurity centers, localized in the central plane of the nanoplatelet has been obtained. It has been shown that the magnetic field influence on the electron energy levels weakens with increasing the number of impurities.