

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛАХ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ**

Русских К.И. (СПБАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

Научный руководитель - д.ф.-м.н., проф. Родина А.В. (ФТИ им. А.Ф. Иоффе)

**Введение.** Работа посвящена исследованию энергетического спектра и волновых функций (в.ф.) электрона в полупроводниковых сферических нанокристаллах (НК), окруженных диэлектрической средой. Предполагается, что матрица характеризуется малой диэлектрической проницаемостью и эффективной массой электрона, равной массе свободного электрона. Стандартная модель сферической квантовой точки с бесконечным потенциальным барьером [1], предполагающая исчезновение в.ф. электрона на границе НК, не позволяет описать вытекание электронной плотности из НК в матрицу и, как следствие, взаимодействие электронных состояний в двух взаимодействующих НК. Стандартная модель не позволяет также учесть специфику структуры, связанную с различием эффективной массы электрона внутри НК и в окружающей диэлектрической среде. В работе исследованы НК с конечным потенциальным барьером и учтены все перечисленные выше эффекты. Рассмотрены граничные условия (ГУ) для волновых функций на поверхности НК в виде равенства радиальных компонент в.ф. и нормальной компоненты скорости, а также обобщённые ГУ для бесконечного потенциального барьера [2].

**Основная часть.** Проведён теоретический расчёт энергий и волновых функций электронных состояний s, p, d симметрий, характеризующихся значениями орбитального момента  $l=0,1,2$ , соответственно. За единицу энергии принято значение наименьшего энергетического уровня s-симметрии в НК с бесконечным потенциальным барьером. Расчёт выполнен для сферической квантовой точки в зависимости от безразмерной высоты барьера и для разных отношений масс электрона внутри и снаружи НК.

Численно показано, что даже при очень больших значениях потенциального барьера, стандартные граничные условия, соответствующие приближению бесконечно высокого барьера, плохо описывают энергетический спектр, особенно для возбужденных состояний. Показано, что при уменьшении отношения масс, увеличивается отклонение расчетных уровней энергии от асимптотических, равных значениям энергий в бесконечно глубокой яме. При этом вероятность найти электрон на границе значительно возрастает, хотя вероятность найти электрон вне квантовой точки – убывает.

Рассчитана энергетическая поправка, связанная с потенциалом самодействия в методе заряда-изображения [3], в зависимости от радиуса НК и разницы диэлектрических проницаемостей в диэлектрической матрице и внутри НК. Этот эффект приводит к увеличению энергии уровня в НК большого размера и может компенсировать понижение энергетического уровня, обусловленного конечной высотой барьера и разницей масс электрона.

**Выводы.** Исследовано влияние различия диэлектрических проницаемостей материала НК и окружающей его матрицы, а также различия масс в полупроводнике и диэлектрике на энергетический спектр электрона и его локализацию.

**Список использованных источников:**[1] Ал.Л. Эфрос, А.Л. Эфрос, ФТП, **40**, 337-340 (1982).[2] A. Rodina, A. Alekseev, Al. L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer, Phys. Rev. B., **65**, 125302 (2002).[3] Г.Б. Григорян, А.В. Родина, Ал. Л. Эфрос, ФТТ, **32**, 3512-3521 (1990).