

## Projekt pt. „ półprzewodnikowe nanoklastry”

Maciej Lipok, 229830, Inżynieria Materiałowa 5rok

### 1. Obliczenia energii najniższego poziomu wzbudzonego, podstawowy wzór Brusa

W aplikacji Spyder (język Python) napisano program liczący energię najniższego poziomu wzbudzonego wybranych nanoklastrów półprzewodnikowych przy pomocy podstawowego wzoru Brusa. Wzór, oraz parametry takie jak masa efektywna elektronu, dziury oraz stała dielektryczna materiału wzięto z publikacji Brus, L. E. (1984). "Electron–electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state." *The Journal of Chemical Physics* **80**(9): 4403-4409.

Wyrysowano wykresy dla wszystkich materiałów opisanych w tej publikacji i otrzymano parametry zbliżone do wartości z tabeli 2 przywołanej wcześniej publikacji:

A	$E_g(0\text{ K})$ (eV)	$m_e^*$	$m_h^*$	$\epsilon$	B	ZnO	CdS	GaAs	InSb
InSb	0.24	0.015	0.39	15.6	Kinetic	0.27	0.27	$\approx 0.65$	$> 1$
GaAs	1.52	0.07	0.68	10.9	Coulomb	-0.24	-0.15	-0.08	-0.06
CdS	2.58	0.19	0.8	5.7	Polarization	0.06	0.05	0.03	0.02
ZnO	3.44	0.24	0.45	3.7	Total Shift	0.09	0.17	$\approx 0.60$	$> 1$

Rys.1 A) Tabela 1 z publikacji<sup>1</sup> z parametrami badanych materiałów półprzewodnikowych B) wyliczone w publikacji<sup>1</sup> wartości energii kinetycznej, odpychania kulombowskiego oraz polaryzacji dla nanoklastrów o wielkości  $R=30\text{ [Å]}$

Wzór Brusa podany w publikacji:

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2} \left[ \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \right] - \frac{1.8e^2}{\epsilon_2 R} + \frac{e^2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \left( \frac{S}{R} \right)^{2n},$$

W celu oszacowania energii polaryzacji skorzystano ze wzoru podanego w innej publikacji<sup>2</sup>:

$$E_{\text{pol}} = \frac{e^2}{R} \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \left( \frac{S}{R} \right)^{2k} =$$

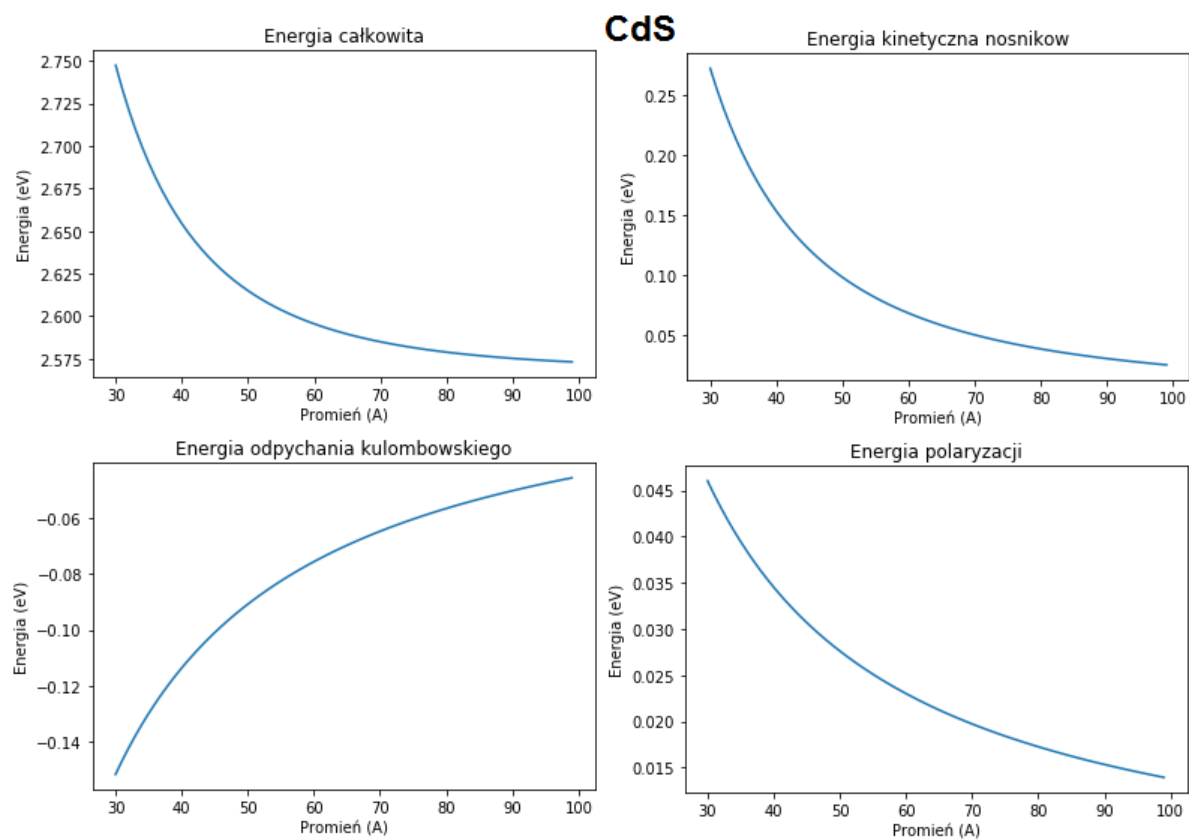
$$\frac{e^2(\epsilon - 1)}{2\pi R^2 \epsilon_{\text{CdSc}} \epsilon_0} \int_{r=0}^R \sin^2\left(\frac{\pi r}{R}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k+1}{(\epsilon+1)k+1} \left(\frac{r}{R}\right)^{2k} dr$$

Otrzymane wartości energii otrzymane z wzoru Brusa dla  $R=30\text{ [Å]}$ , dla 4 różnych materiałów półprzewodnikowych(CdS, ZnO, GaAs, InSb) zestawiono w Tabeli 1. Wykresy jak zmieniają się poszczególne energie oraz energia 1 poziomu wzbudzenia w przedziale średnicy klastra (30,100) [Å] przedstawiono oraz na Rys.2

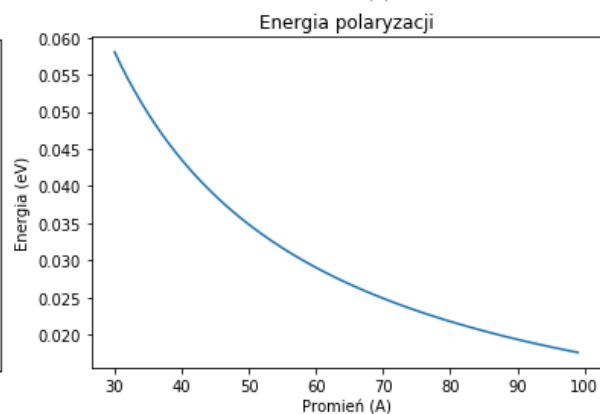
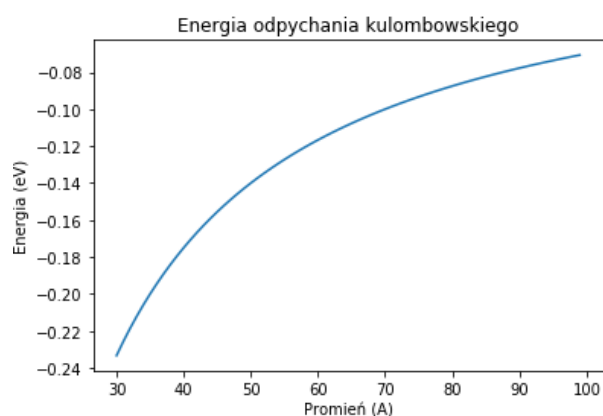
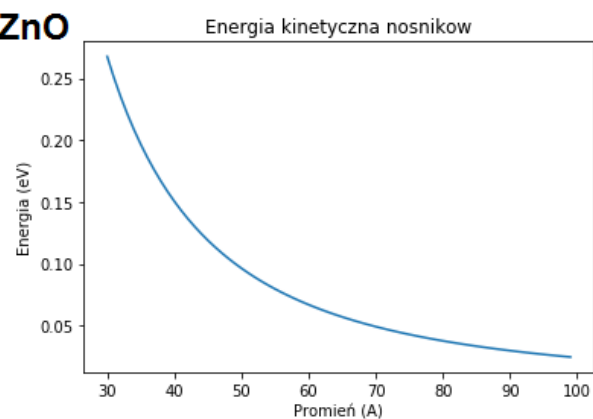
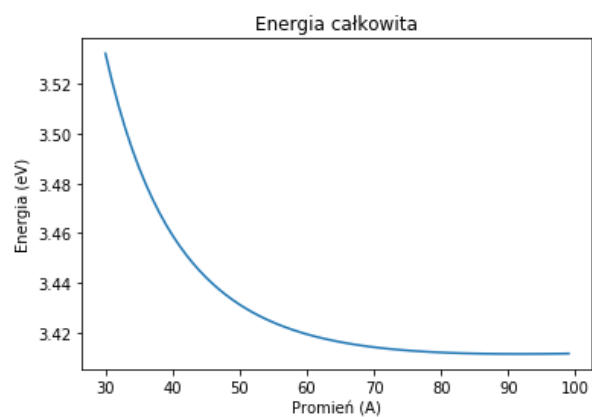
Tabela 1

[eV]	CdS	ZnO	GaAs	InSb
E. kinetyczna	0.273	0.267	0.660	2.899
E kulombowska	-0.151	-0.23	-0.079	-0.055
E polaryzacji	0.046	0.058	0.028	0.021
Całkowite przesunięcie	0.167	0.092	0.609	2.86
E wzbudzenia	2.747	3.532	2.129	3.105

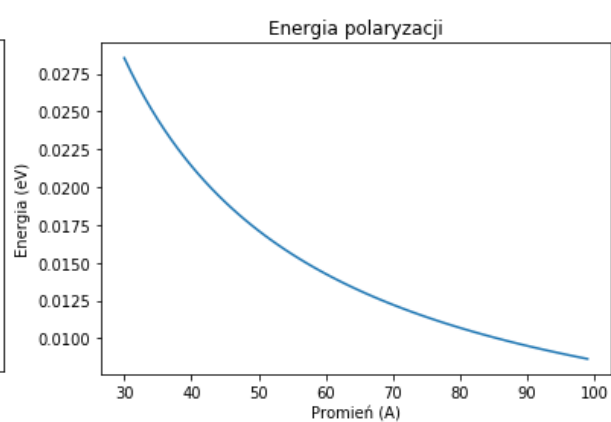
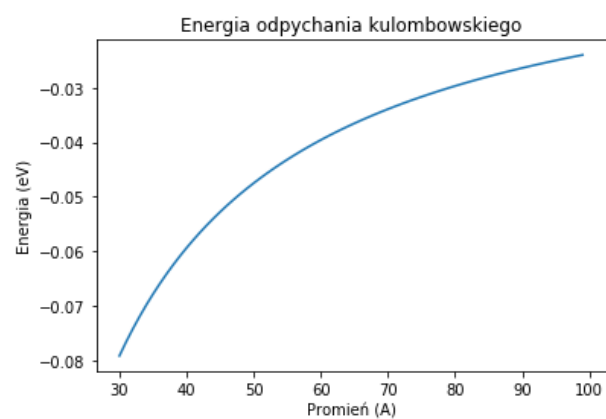
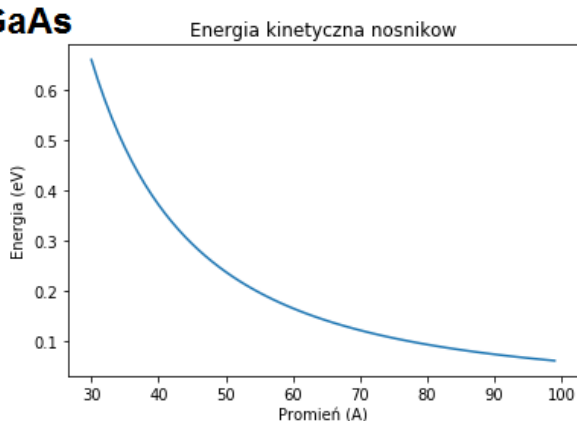
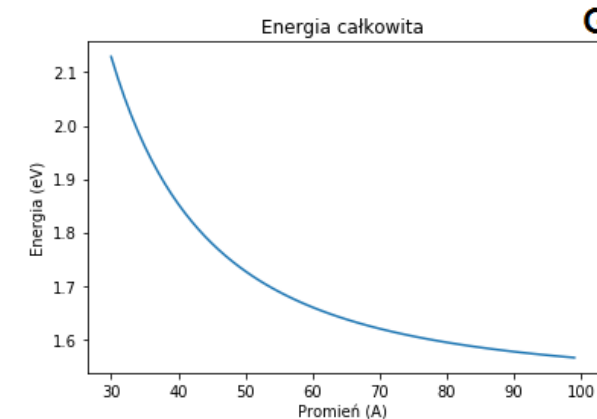
Rys.2

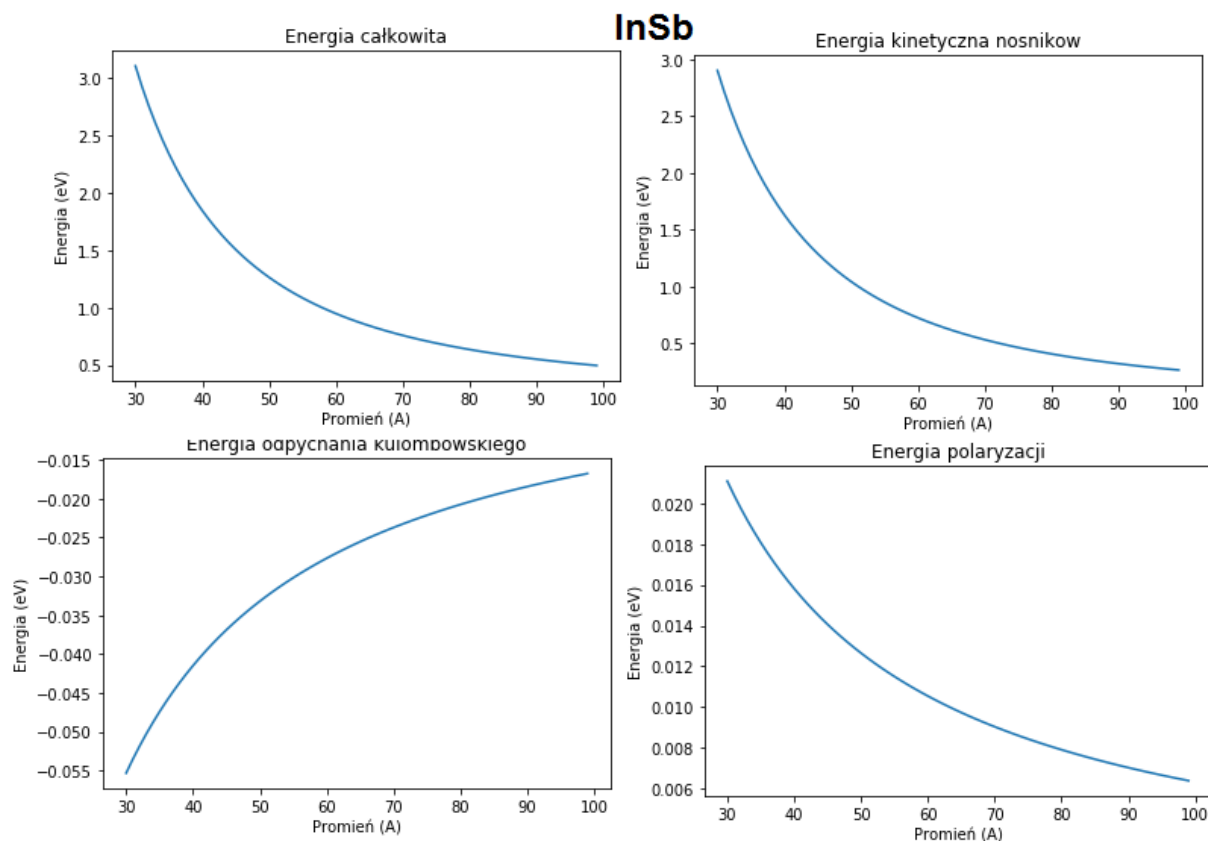


## ZnO



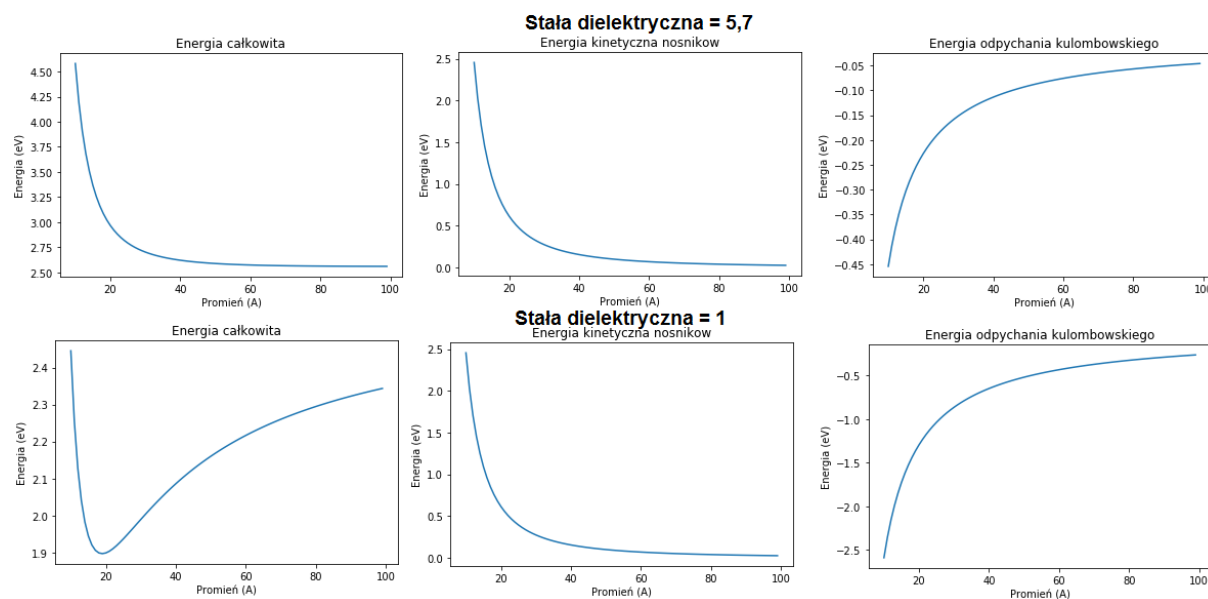
## GaAs



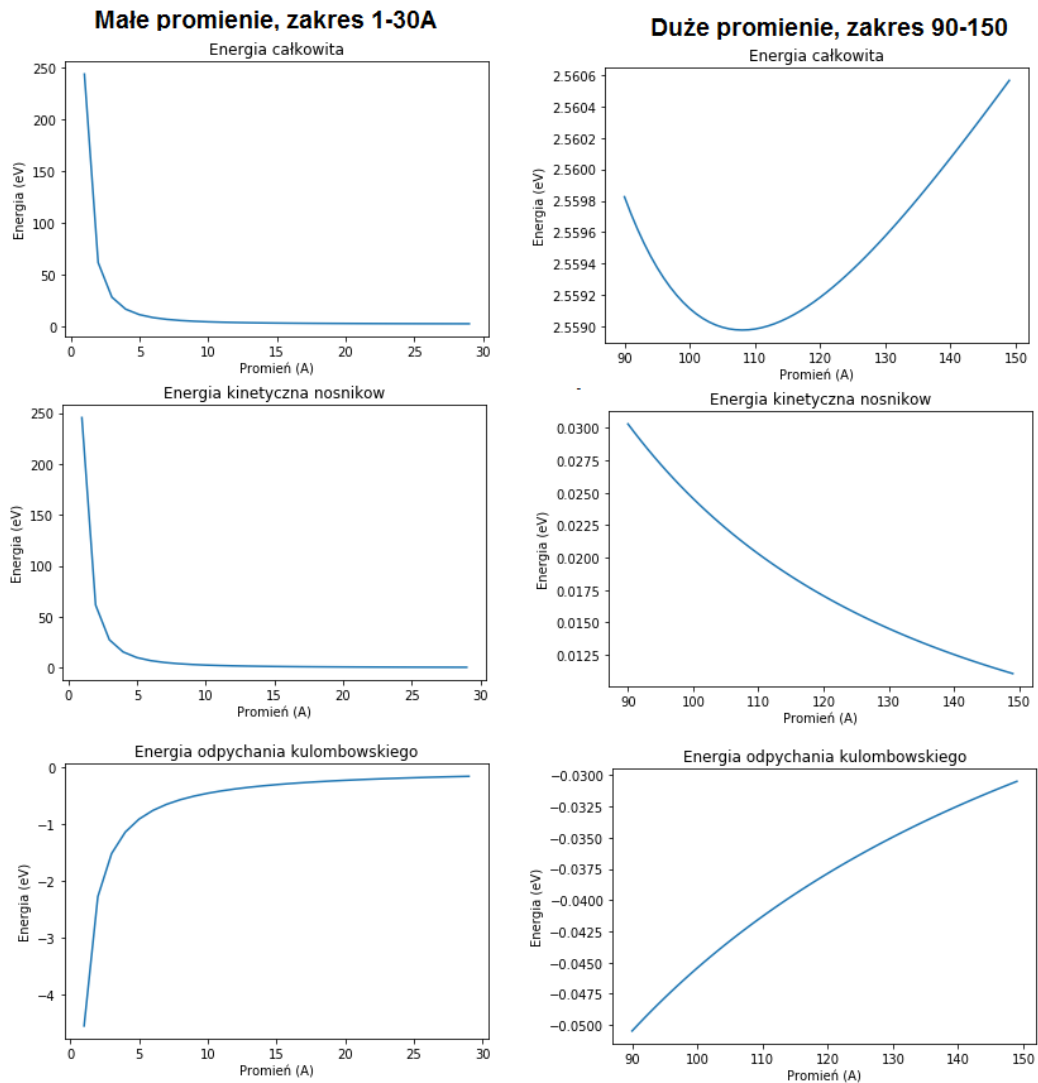


W przypadku struktury InSb zastosowanie podstawowego wzoru Brusa nie wystarcza, ponieważ masa efektywna elektronu jest tak mała, że jest całkowicie ekranowana. W tym wypadku należy zastosować warunki brzegowe Ben Daniela i Duke'a, aczkolwiek możliwe że należy posłużyć się inną metodą niż przybliżeniem masy efektywnej.

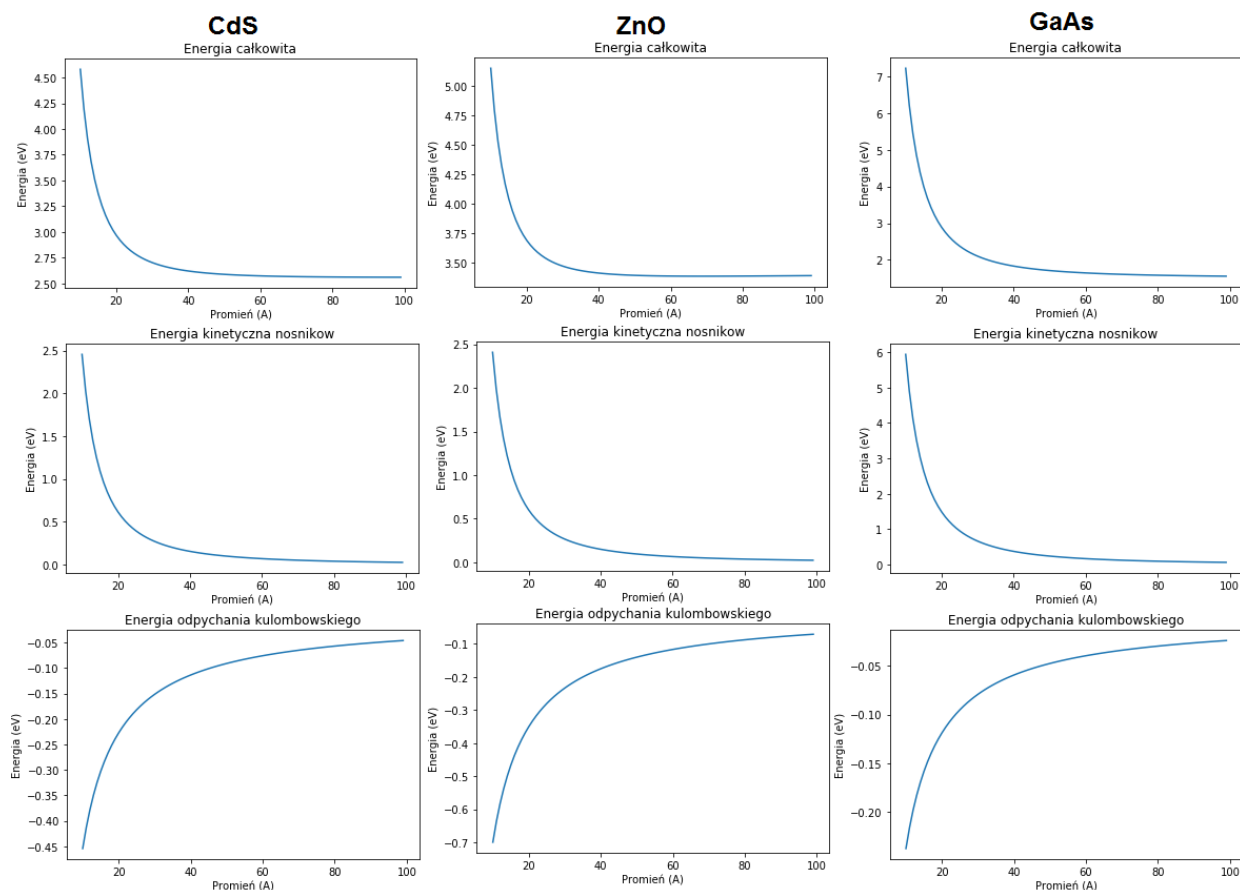
1. Przy małych stałych dielektrycznych energia kulombowska jest równa energii kinetycznej, jako że jej wartość rośnie wolniej niż wartość energii kinetycznej maleje następuje przegięcie funkcji. (Dla CdS)



2. Dla bardzo małych promieni energia kinetyczna rośnie bardzo szybko wychodząc poza fizyczne wyniki. Jest to związane z faktem, że dla tak małych obiektów przestaje działać przybliżenie masy efektywnej i należy tutaj rozpatrywać także efekty powierzchniowe oraz rozkład gęstości ładunku. Dla bardzo dużych promieni zaś zarówno energia kinetyczna, kulombowska i polaryzacji dążą do 0, a przerwa energetyczna dąży do wartości z struktury objętościowej.



3. Niefizyczne rezultaty przy promieniach mniejszych niż 30Å dla półprzewodników szeroko przerwowych jak ZnO( $E_g=3,44\text{eV}$ ) czy CdS( $E_g=2,58\text{eV}$ ). Ponadto materiały o szerokiej przerwie wzbronionej osiągają wartość przerwy wzbronionej materiału objętościowego szybciej niż materiały wąskoprzerwowe (lepiej widoczne na Rys. 2).



#### Bibliografia:

1. Brus, L. E., Electron-electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state. *The Journal of Chemical Physics* **1984**, 80 (9), 4403-4409.
2. Kippeny, T.; Swafford, L. A.; Rosenthal, S. J., Semiconductor Nanocrystals: A Powerful Visual Aid for Introducing the Particle in a Box. *Journal of Chemical Education* **2002**, 79 (9), 1094.