

І.К. Юрчишин

## Електронний енергетичний спектр напівпровідникових квантово-розмірних структур

*Фізико-хімічний інститут Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна, e-mail: [i.yurchyshyn@ukr.net](mailto:i.yurchyshyn@ukr.net)*

Досліджено методологію побудови електронного енергетичного спектру квантової ями з нескінченно високими стінками, безмежно довгого циліндричного квантового дроту, надгратки з квантових ям та стеку квантових точок, а також наведено конкретні приклади спектру для наноструктур на основі PbSe та PbS. Показано можливість використання результатів розрахунку енергетичного спектру простіших квантово-розмірних структур для аналогічних обрахунків у наноструктурах вищої складності. Виявлено спосіб керування властивостями стеку квантових точок за рахунок зміни його характерних геометричних розмірів.

**Ключові слова:** енергетичний спектр, наноструктури, квантово-розмірні ефекти.

*Стаття поступила до редакції 23.07.2011; прийнята до друку 15.09.2011.*

### Вступ

Розрахунок термоелектричних (ТЕ) параметрів нанооб'єктів - квантових ям (КЯ), дротів (КД), точок (КТ) і надграток – зазвичай складається з трьох етапів. На першій стадії задача полягає у знаходженні можливих станів основного носія у наноструктурі. Далі, виходячи з отриманого енергетичного спектру, шукається час релаксації для конкретного механізму розсіювання носіїв. У випадку термоелектричних явищ розглядають взаємодію електронів з акустичними фононами, яка при кімнатних температурах є домінуючою. Обрахунок власне транспортних коефіцієнтів – коефіцієнта Зеєбека ( $S$ ), електро- ( $\sigma$ ) і теплопровідності ( $\chi$ ) – виконується на третьому етапі як результат розв'язку рівнянь Больцмана. Такий підхід називається напівкласичним [1].

Модель квантової ями зручно застосовувати для опису транспортних процесів у тонких плівках. Перспектива значного росту термоелектричної добротності  $ZT$  нанодротини, зокрема при зменшенні її діаметру [2], та можливість синтезу як масивів так і окремих нанодротів [3] призводить до необхідності розрахунку оптимальних значень кінетичних коефіцієнтів у них.

Якщо під надграткою розуміти періодичну структуру як послідовність незалежних квантових ям [4,5] – багатократно квантову яму (БКЯ), – то в цьому випадку енергетичний спектр шукається так само як для однієї КЯ. Глибина реальних потенціальних ям у надгратках є обмеженою. Рішення стаціонарного рівняння Шредінгера для

одновимірної потенціальної ями скінченної глибини можна знайти в підручниках по квантовій механіці [6]. В [5] було показано, що зі зменшенням глибини ями зменшується як число зв'язаних станів, так і відстань між ними, але стан з  $n = 1$  існує при будь-якій висоті бар'єру. Таким чином, у всіх потенціальних ямах в БКЯ для кожного типу носіїв існує по крайній мірі один зв'язаний стан. Експериментальне підтвердження цієї властивості [4] дозволило застосувати наближення ефективної маси для опису властивостей частинок в потенціальній ямі скінченної глибини.

Теоретичні дослідження показали, що хороші ТЕ властивості може демонструвати послідовність КТ вздовж нанодроту – стек квантових точок (СКТ) [7]. Можливість експериментального синтезу стеку і структур на його основі [8] також зумовлює необхідність розрахунку розрахунку станів носія у ньому.

Метою даної роботи є представлення методики отримання і характерних особливостей енергетичного спектру носіїв у наноструктурах різного типу в рамках першого етапу розрахунку їх термоелектричних властивостей.

### І. Квантові ями

У квантовій ямі з нескінченно високими стінками (рис. 1) електрони обмежені в напрямку  $OZ$ , а в  $X$ - та  $Y$ -напрямах їх рух вільний.

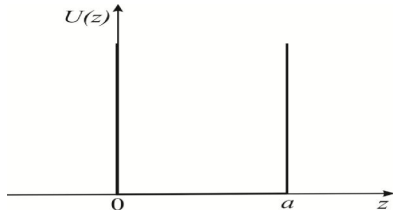


Рис. 1. Вигляд потенціалу КЯ з непроникними стінками.

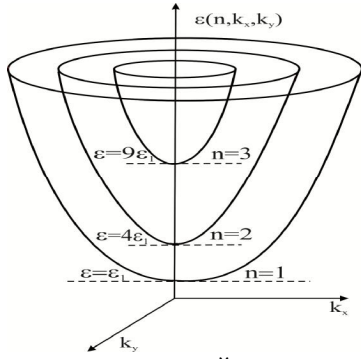


Рис. 2. Частково квантований спектр носіїв струму в КЯ з непроникними стінками [9].

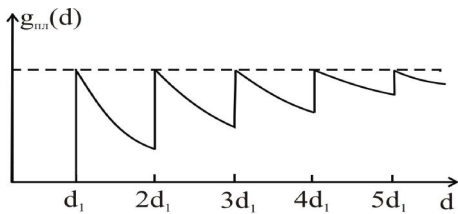


Рис. 3. Залежність густини станів від ширини КЯ з непроникними стінками при заданій енергії  $\epsilon$  ( $\epsilon = \text{const}$ ). Штриховою лінією показано густину станів масивного зразка [9].

Електронна хвильова функція і власні значення енергії за умови параболічності енергетичних зон визначаються виразами [10]:

$$y = \left(\frac{2}{\Omega}\right)^{\frac{1}{2}} \exp(ik_x x + jk_y y) \sin\left(\frac{npz}{d}\right) \quad (1)$$

$$E = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_z^* d^2} n^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (2)$$

де  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ ,  $m_z^*$  - ефективна маса електрона вздовж напрямку обмеження;  $m_p^* = \sqrt{m_x^* m_y^*}$ ,  $m_x^*$ ,  $m_y^*$  - ефективні маси електрона вздовж осей  $OX$  та  $OY$ ,  $\Omega$  - загальний об'єм шару,  $d$  - ширина ями,  $n$  - квантове число, яке набуває величин натуральних чисел.

Як показано на рис. 2 спектр носіїв у КЯ складається з зон, які перекриваються. Його характерною особливістю є наявність скінченної мінімальної енергії  $\epsilon_1$  у відповідності з принципом невизначеності:

$$\epsilon_1 \equiv e(n=1, k_x = k_y = 0) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_z^* d^2} \quad (3)$$

Відомо, що причиною немонотонного ходу товщинних ( $d$ ) залежностей кінетичних параметрів квантово-розмірних структур є осциляційний

характер  $d$ -залежності густини станів. Сумуючи по всіх значеннях квантових чисел  $n$ ,  $k_x$ ,  $k_y$ , можна отримати вираз для густини станів КЯ  $g_{КЯ}$  з параболічним законом дисперсії [9]:

$$g_{КЯ}(e, d) = g_m(e) \left[ \frac{\sqrt{e/e_1}}{\sqrt{e_1}} \right] / \sqrt{e/e_1}, \quad (4)$$

де  $\left[ \sqrt{e/e_1} \right]$  - ціла частина від  $\sqrt{e/e_1}$ , тобто число підзон, дно яких лежить нижче заданої енергії  $e$ ;  $\epsilon_1 = \epsilon_1(d)$  - енергія найнижчого рівня (3), а

$$g_m(e) = \frac{(2m)^{3/2}}{2p^2 \hbar^3} e^{1/2} \quad (5)$$

- густина станів у масивному зразку,  $m$  - ефективна маса носіїв струму.

З (4) видно, що для значень  $d_n$ , коли  $(e/\epsilon_1)^{1/2}$  - ціле, тобто коли дно якої-небудь підзони співпадає із заданою енергією  $e$ ,  $g_{КЯ}(e, d_n) = g_m(e)$ . При інших ширинах з ростом величини  $d$  густина станів  $g_{КЯ}(d)$  зменшується пропорційно  $1/d$  доти, поки не зміниться на одиницю число підзон, розміщених нижче рівня  $e$  (рис. 3).

Кількість квантованих рівнів, що лежать нижче заданої енергії, визначається першим доданком (2):

$$E_n = \frac{p^2 \hbar^2}{2m_z^* d^2} n^2. \quad (6)$$

Підставляючи у (6) значення енергії Фермі  $E_F$ , можна знайти ширину  $d$ , при якій нижче рівня Фермі лежить задана кількість рівнів  $n$ . Різниця між значеннями цієї ширини для двох найближчих рівнів визначає період осциляцій  $\Delta d$ , рівний ширині  $d_{\text{мін}}$ , при якій дно найнижчої підзони співпадає з енергією  $E_F$ . Таким чином з (6) випливає:

$$\Delta d = d_{\text{мін}} = \frac{I_F}{2} = \frac{h}{\sqrt{8m_z^* E_F}} \quad (7)$$

Як видно з (7) період осциляцій густини станів і, відповідно, кінетичних параметрів КЯ визначається значенням рівня Фермі та ефективною масою носіїв ями. Визначення періоду осциляцій  $\Delta d_{\text{експ}}$  з експериментальних  $d$ -залежностей ТЕ параметрів дозволяє оцінити значення енергії Фермі, яке, разом із значенням ефективної маси, характеризує конкретну сполуку у формі квантової ями. Окрім того, зміна періоду осциляцій  $d$ -залежностей ТЕ параметрів дає можливість відслідкувати зміну  $E_F$  на різних проміжках ширини ями.

## II. Нанодротина

Для безмежно довгого циліндричного квантового дроту (ЦКД) радіусом  $R$ , виготовленого з матеріалу "1" і зануреного в середовище "2" (рис. 4), зручно використовувати циліндричну систему координат.

У ЦСК оператор Лапласа:

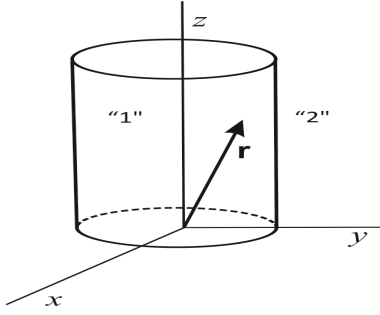


Рис. 4. Модель циліндричного квантового дроту "1", поміщеного в середовище "2".

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (8)$$

Так як потенціал  $V(\mathbf{r})=V(\rho)V(z)$  володіє циліндричною симетрією, розв'язок рівняння Шредінгера зручно шукати у вигляді:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(r)\Psi(z)\exp(imx); m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

Використовуючи наближення роздільності потенціалу [11]:

$$V(r, z) = V(r) + V(z), \quad (10)$$

рівняння Шредінгера набуває вигляду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right] \Psi(z) + \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} R(r) - \frac{m^2}{r^2} R(r) \Psi(z) \right\} = \Psi(z) R(r) (E - V(r) - V(z)) \quad (11)$$

Розділяючи змінні, приходимо до двох незалежних рівнянь:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (12)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \left\{ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[ r \frac{dR(r)}{dr} \right] - \frac{m^2}{r^2} R(r) + V(r) R(r) \right\} = E_m^{rad} R(r) \quad (13)$$

Приймаючи дно зони провідності  $E_{c1}$  середовища КД за 0 і припускаючи, що воно відносно вакууму лежить нижче  $E_{c2}$  матеріалу бар'єру, обмежуючий потенціал матиме вигляд:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ V_0, & r > R \end{cases}, \quad (14)$$

При цьому ефективна маса електрона:

$$m(r) = \begin{cases} m_1, & 0 \leq r \leq R \\ m_2, & R \leq r \leq \infty \end{cases}, \quad (15)$$

Тоді (12) – рівняння для вільного руху частинки всередині дроту вздовж осі OZ. А (13) розкладається на два рівняння:

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_1(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} R_1(\rho) - \left( \frac{m^2}{\rho^2} - k^2 \right) R_1(\rho) = 0, \quad (16)$$

$$\frac{d^2}{d\rho^2} R_2(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} R_2(\rho) - \left( \frac{m^2}{\rho^2} + \gamma^2 \right) R_2(\rho) = 0, \quad (17)$$

де:

$$k = \sqrt{\frac{8p^2 m_i E}{h}} \quad (18)$$

$$g = \sqrt{\frac{8p^2 m_2 (V_0 - E)}{h}} \quad (19)$$

Загальні розв'язки рівнянь (16), (17):

$$R_1(r) = C_1 \text{BesselJ}(m, kr) + C_2 \text{BesselY}(m, kr) \quad (20)$$

$$R_2(r) = C_3 \text{BesselI}(m, gr) + C_4 \text{BesselK}(m, gr) \quad (21)$$

Так як

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \text{BesselY}(m, k\rho) = \infty \quad (22)$$

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \text{BesselI}(m, k\rho) = \infty \quad (23)$$

за визначенням хвильової функції  $C_2 = C_3 = 0$ . Тоді:

$$R_1(r) = C_1 \text{BesselJ}(m, kr) \quad (24)$$

$$R_2(r) = C_2 \text{BesselK}(m, gr) \quad (25)$$

Умовою існування розв'язку системи рівнянь зшивки хвильових функцій та їх похідних на межі розділу середовищ

$$\begin{cases} R_1(R) = R_2(R) \\ \left. \frac{\partial R_1}{\partial r} \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial R_2}{\partial r} \right|_{r=R} \end{cases} \quad (26)$$

є рівність нулю її визначника:

$$k \frac{\text{BesselJ}(m+1, k \cdot R)}{\text{BesselJ}(m, k \cdot R)} - g \frac{\text{BesselK}(m+1, g \cdot R)}{\text{BesselK}(m, g \cdot R)} = 0 \quad (27)$$

Аналітичний вигляд розв'язку рівняння (27) для можливих значень енергії частинки у КД можна отримати лише в рамках певного наближення. Однак, система комп'ютерної алгебри дозволяє числовими методами знаходити точні розв'язки цього рівняння при фіксованому числі  $m$ .

Власні значення енергії ЦКД класифікуються кутовим  $m$  і радіальним квантовим числом  $s$ , яке нумерує розв'язки рівняння (27) при даному  $m$ , а також хвильовим вектором  $k_z$  вільного руху електрона в Z-напрямку. Загальний розв'язок рівняння Шредінгера для ЦКД має вигляд:

$$E = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_1^*} + E_{ms} \quad (28)$$

Використовуючи сполуки IV-VI для комбінування наноструктур можна легко досягнути необхідного значення обмежуючого потенціалу  $V_0$ . Для нанодроту PbSe, поміщеного в середовище PbS (табл. 1) величина  $V_0 = \chi_{\text{PbSe}} - \chi_{\text{PbS}} = 1,4$  еВ. Якщо радіус дроту  $R = 5$  нм, розв'язок (27) дає 6 енергетичних рівнів  $E_{ms}$  (табл. 2), чотири з яких відповідають квантовому числу  $s = 1$  та два –  $s = 2$ . Слід зазначити, що радіус КД  $R$  має визначальний вплив на кількість енергетичних станів носія у ньому.

Таблиця 1

Спорідненість до електрона  $\chi$ , ширина забороненої зони  $E_g$  та електронна ефективна маса  $m$  сполук PbSe і PbS [12-15].

Сполука	$\chi$ , eV	$E_g$ , eV	$m \cdot m_e$
PbSe	4.7	0.29	0.04
PbS	3.3	0.41	0.08

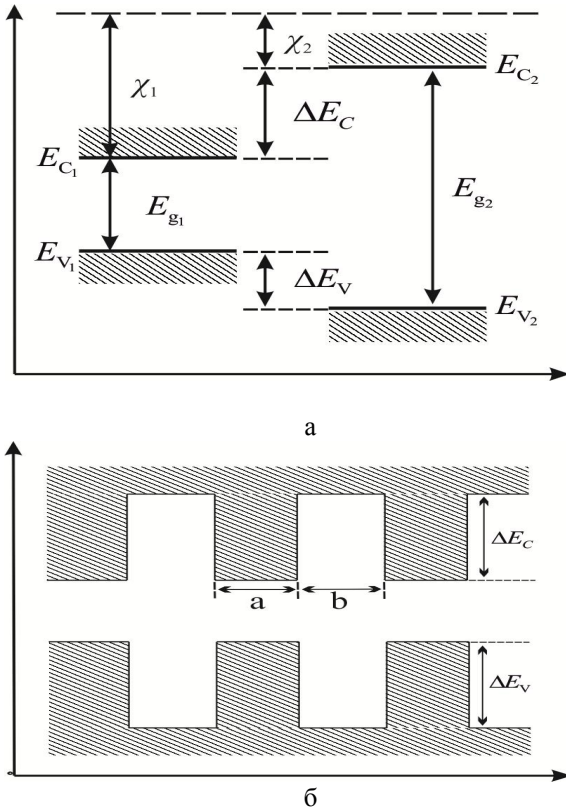
**Таблиця 2**

Енергетичні рівні  $E_{ms}$  (eВ) квантованого руху електрона ЦКД PbSe/PbS радіусом  $R = 5$  нм відраховані від дна зони провідності PbSe.

$\begin{matrix} s \\ m \end{matrix}$	1	2
0	0.1754	0.8723
1	0.4382	1.2983
2	0.7672	-
3	0.1354	-

### III. Надгратки

Якщо ями і бар'єри надгратки квантових ям (НГКЯ) підбрані таким чином, що положення країв зони провідності і валентної зони відносно вакууму у них розміщені так, як показано на рис. 5,а [16], потенціал, що діє на носії обох типів, матиме прямокутну форму (рис. 5,б). Тоді параметри надграткових підзон можна визначити з рішення рівняння Шредінгера для простої одновимірної моделі Кроніга-Пенні.



**Рис. 5.** Розміщення країв зони провідності і валентної зони відносно рівня вакууму (штрихована лінія) в окремих речовинах, не приведених до контакту (а), та в композиційній надгратці типу I (б). По осі абсцис відкладена просторова координата, а по осі ординат – енергія [16].

Періодичний вигляд потенціалу

$$V(z) = \begin{cases} 0, & nd_z < z < nd_z + a_z \\ V_0, & nd_z - b_z < z < nd_z \end{cases}, \quad (29)$$

і мультиплікативне представлення хвильової функції

$$y(\vec{r}) = y(x)y(y)y(z), \quad (30)$$

приводять до двох незалежних рівнянь вільного руху частинки в X- та Y-напрямах та до рівнянь

$$\frac{d^2\Psi_1(z)}{dz^2} + a^2\Psi_1(z) = 0. \quad (31)$$

$$\frac{d^2\Psi_2(z)}{dz^2} - b^2\Psi_2(z) = 0. \quad (32)$$

в напрямку OZ, де:

$$a = \sqrt{\frac{8pm_1E}{h^2}}. \quad (33)$$

$$b = \sqrt{\frac{8pm_2(E-V_0)}{h^2}}. \quad (34)$$

де  $m_1$  та  $m_2$  – величини ефективних мас у середовищі ями і бар'єру відповідно. У (29)  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ;  $d_z$  – період надгратки,  $a$  – ширина ями, а (32) – в межах бар'єру. Згідно з теоремою Блоха загальний вигляд розв'язку рівняння Шредінгера з періодичним потенціалом:

$$\Psi(z) = e^{ikz}u(z). \quad (35)$$

Розв'язки рівнянь, які отримуються після підстановки (35) у (31), (32), мають вигляд:

$$U_1(z) = Ae^{i(a-k)z} + Be^{-i(a+k)z}. \quad (36)$$

$$U_2(z) = Ce^{i(b-k)z} + De^{-i(b+k)z}. \quad (37)$$

Підстановка (36), (37) в умови зшивки та періодичності хвильових функцій

$$\begin{cases} U_1(a) = U_2(a); \\ \left(\frac{dU_1(z)}{dz}\right)_{z=a} = \left(\frac{dU_2(z)}{dz}\right)_{z=a}; \\ U_1(a) = U_2(a+b); \\ \left(\frac{dU_1(z)}{dz}\right)_{z=a} = \left(\frac{dU_2(z)}{dz}\right)_{z=(a+b)} \end{cases} \quad (38)$$

дає систему чотирьох рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів  $A, B, C, D$ , яка має розв'язок, коли її детермінант рівний нулю. З цієї умови випливає трансцендентне рівняння моделі Кроніга-Пенні [17]:

$$\cos(kd) = ch(bb)\cos(aa) + \frac{b^2 - a^2}{2ab} sh(bb)\sin(aa). \quad (39)$$

В наближенні сильного зв'язку ( $V_0 \gg 0$ ) розв'язок (39) має вигляд [17]:

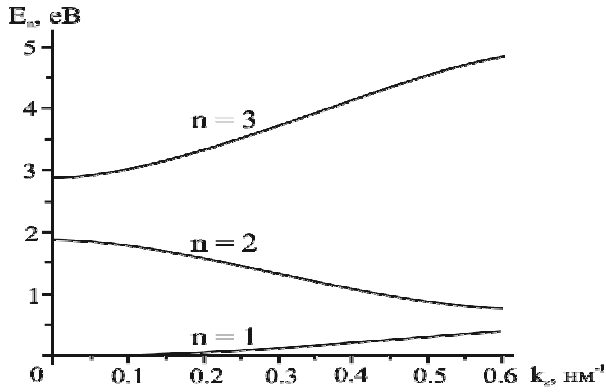
$$E_n(k_z) = E_n^{(0)} + \Delta E, \quad (n=1,2,\mathbf{K}), \quad (40)$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\mathbf{h}^2 p^2}{2m_1 b^2} n^2, \quad (41)$$

$$\Delta E = (-1)^n \frac{8\mathbf{h}E_n^{(0)}}{b\sqrt{2m_1}} e^{-\left(\frac{1}{\mathbf{h}}\right)\sqrt{2m_2V_0}a} \cos(kd), \quad (42)$$

а загальний розв'язок рівняння Шредінгера для надгратки:

$$E_n(k_x, k_y, k_z) = \frac{\mathbf{h}^2 k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\mathbf{h}^2 k_y^2}{2m_y^*} + E_n(k_z) \quad (43)$$



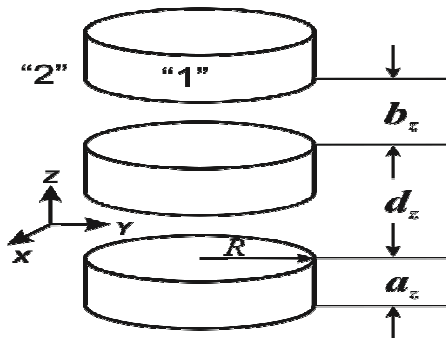
**Рис. 6.** Енергетичні зони  $E_n(k_z)$  квантованого руху електрона в НГКЯ PbSe/PbS, відраховані від дна зони провідності PbSe. Ширина ями  $a = 2$  нм, а ширина бар'єру  $b = 3$  нм.

Якщо умова досить високого потенціалу не виконується, то розв'язок (39) можна шукати чисто графічним методом. Так як система комп'ютерної алгебри дозволяє зміною осей на основі співвідношення  $k_z(E)$ , яке з рівняння (39) знаходиться точно, побудувати залежність  $E(k_z)$ , оцифрованою і наступною апроксимацією отриманих графіків можна отримати аналітичні вирази залежності енергії від хвильового вектора  $E_n(k_z)$  для потрібних зон.

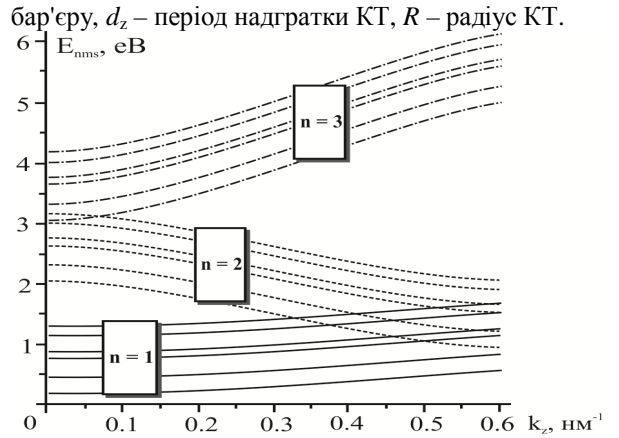
На рис. 6 зображено залежності енергетичних рівнів  $E_n$  від хвильового вектора  $k_z$  як розв'язки рівняння (39) для квантованого руху електрона в поперечному до надгратки PbSe/PbS напрямку. Змінюючи ширину ями  $a$  і бар'єру  $b$  можна суттєво змінювати відстань між рівнями, а також досягнути нульового значення забороненої зони і відповідно напівметалічних властивостей надгратки.

#### IV. Стеки квантових точок

Стек квантових точок (СКТ) являє собою послідовність квантових точок (КТ) вздовж нанодоту, поміщених в деякий матеріал (рис. 6). При цьому дно зони провідності матеріалу КТ лежить нижче дна зони провідності матеріалу-господаря, як на мал. 5,а.



**Рис. 6.** Модель СКТ:  $a_z$  – висота КТ і ширина КЯ у надгратці,  $b_z$  – відстань між точками і ширина



**Рис. 6.** Мінізони СКТ PbSe/PbS, відраховані від дна зони провідності PbSe.  $R = 5$  нм,  $a = 2$  нм,  $b = 3$  нм.

Циліндрична симетрія потенціалу  $V(\mathbf{r}) = V(\rho, z)$  пропонує вигляд хвильової функції у формі (9). Розділяючи потенціал (10), приходимо до двох незалежних рівнянь (12), (13). Розв'язок (13) проводиться так само, як для безмежно довгого нанодоту і приводить до рівняння (27). Періодичність потенціалу забезпечує процедуру розв'язку рівняння (12) аналогічну тому, як це робилося для надграток. В результаті приходимо до трансцендентного рівняння моделі Кроніга-Пенні (39).

Загальний розв'язок рівняння Шредінгера для СКТ має вигляд:

$$E_{nms}(k_z) = E_n(k_z) + E_{ms}^{rad}. \quad (43)$$

Підбір геометричних параметрів стеку, аналогічних тим, які використано при розрахунках енергетичних спектрів ЦКД (табл. 2) та НГКЯ (рис. 6) дозволяє використати отримані дані для побудови мінізон СКТ PbSe/PbS (рис. 6). Як видно з рис. 6 такий стек має напівметалічні властивості, бо мінізони з квантовим числом  $n=2$  і  $n=3$  перекриваються. Отримати заборонену зону і, відповідно, напівпровідникові властивості стеку можливо двома способами. По-перше, можна змінювати радіус КТ  $R$ , зменшуючи таким чином кількість рівнів  $E_{ms}^{rad}$ . Другий спосіб полягає в зміні надграткових параметрів стеку: висоти КТ  $a$  і відстані між точками  $b$ .

#### Висновки

В роботі описано процедуру побудови електронного енергетичного спектру квантової ями з нескінченно високими стінками, безмежно довгого циліндричного квантового дроту, надгратки з квантових ям та стеку квантових точок.

Для КЯ з непроникними стінками виявлено осциляційний характер зміни густини станів зі зміною ширини ями. Тобто, зміною ширини ями можна керувати значеннями її кінетичних параметрів. Показано, що експериментальне

визначення періоду осциляцій кінетичних параметрів КЯ дозволяє оцінити значення її енергії Фермі.

Для ЦКД PbSe/PbS було наведено енергетичні рівні квантованого руху електрона вздовж радіуса, а для НГКЯ PbSe/PbS – енергетичні зони як результат обмеженого руху носія в поперечному до надгратки напрямку.

Використовуючи геометричні параметри ЦКД і НГКЯ для СКТ, отримано його енергетичні зони, що забезпечують йому напівметалічні властивості. Також, описано способи зміни величини забороненої зони або перекриття зон стеку за рахунок зміни його геометричних параметрів.

*Робота виконана в рамках наукових проєктів ДФФД України (державні реєстраційні номери 0110U007674, 0111U004951) та МОН України (державний реєстраційний номер 0111U001766).*

*Автор висловлює вдячність науковому керівнику проф. Фрейку Д.М. за постановку задач дослідження та обговорення результатів роботи.*

**Юрчишин І.К.** – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла Прикарпатського національного університету.

- [1] P. Pichanusakorn., P. Bandaru. Nanostructured thermoelectric // *Materials Science and Engineering R*, **67**, pp. 19-63 (2010).
- [2] Y-M Lin, X. Sun, M.S. Dresselhaus Theoretical investigation of thermoelectric transport properties of cylindrical Bi nanowires // *Phys. Rev.*, **62**, p. 4610 (2000).
- [3] A.I. Hochbaum et al. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires // *Nature*, **451**, p. 163, (2007).
- [4] R. Dingle in *Advances in Solid State Physics*, ed. H.J. Queisser, p. 21, Braunschweig: Pergamon-Vieweg (1975).
- [5] R. Dingle, W. Wiegmann, C.H. Henry Quantum States of Confined Carriers in Very Thin  $Al_xGa_{1-x}As$ - $GaAs$  // *Phys. Rev. Lett.*, **33**, p. 827 (1974).
- [6] Л. Шифф *Квантовая механика*. М.: Наука, **1**, 473 с. (1978).
- [7] Yu-Ming Lin, M.S. Dresselhaus Thermoelectric properties of superlattice nanowires // *Physical Review B.*, **68**, 075304 (2003).
- [8] M.S. Gudiksen, L.J. Lauhon, J. Wang, D. Smith, C.M. Lieber Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics // *Nature*, **415**, p. 617 (2002).
- [9] Б.М. Аскеров *Электронные явления переноса в полупроводниках*. Наука, М. Гл. ред. физ.-мат. лит., 320 с. (1985).
- [10] С.М. Bhandari Chapters 4-6 in *CRC Handbook of Thermoelectrics*, ed. D.M. Rowe, CRC Press, 701 p. (1995).
- [11] O.L. Lazarenkova, A.A. Balandin Miniband formation in a quantum dot crystal // *J. Appl. Phys.*, **89**(10), p. 5509 (2001).
- [12] A. Watt, T. Eichman, H. Rubinsztein-Dunlop, P. Meredith Carrier Transport in PbS Nanocrystal Conducting Polymer Composites // *Applied Physics Letters*, **87**(25), p. 253109-1 (2005).
- [13] J.J. Choi, Y-F. Lim, M.B. Santiago-Berrios, M. Oh, B.R. Hyun, L. Sun, A.C. Bartnik, A. Goedhart, G.G. Malliaras, H.D. Abrun, F.W. Wise, T. Hanrath PbSe Nanocrystal Excitonic Solar Sells // *Nano Lett.*, **9**(11), pp. 3749-3755 (2009).
- [14] E.I. Rogacheva, T.V. Tavrina, O.N. Nashchekina, S.N. Grigorov, K.A. Nasedkin Quantum size effects in PbSe quantum wells // *Appl. Phys. Lett.*, **80**(15), pp. 2690-2692 (2002).
- [15] E.I. Rogacheva, O.N. Nashchekina, Y.O. Vekhov, M.S. Dresselhaus, S.B. Cronin Effect of thickness on the thermoelectric properties of PbS thin films // *Thin Solid Films*, **423**, pp. 115–118 (2003).
- [16] М. Херман *Полупроводниковые сверхрешетки*. М.: Мир. с. 13 (1989).
- [17] В.В. Толмачев, Ф.В. Скрипник *Физические основы электроники*. М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика", Институт компьютерных исследований, 464 с. (2009).

I.K. Yurchyshyn

## **Electron Energy Spectrum of Quantum-Size Structures**

*Physics and Chemistry Institute at PreCarpathian Vasyl Stefanyk National University  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, e-mail: [i.yurchyshyn@ukr.net](mailto:i.yurchyshyn@ukr.net)*

The methodology to obtain the electron energy spectrum of a quantum well with infinitely high walls, an infinitely long cylindrical quantum wire, a quantum well superlattice and a quantum dot stack was studied and the specific examples of the spectra for nanostructures based on PbSe and PbS were provided. It was shown the possibility to use the results of the energy spectrum calculation of the simplest quantum-size structures for similar calculations in nanostructures of higher complexity and found the way to control the properties of a quantum dot stack changing its geometric characteristics.