

# ხვრელური გამტარობის გაუმჯობესების პერსპექტივები ZnO-ს ნანოსადენებში

*თამარ ჭელიძე*

*თამაზ კერესელიძე, თეიმურაზ ნადარეიშვილი*

ელ-ფოსტა: [tcchelidze@tsu.ge](mailto:tcchelidze@tsu.ge)

ფიზიკის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა  
ფაკულტეტი, ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო  
უნივერსიტეტი, ჭავჭავაძის გამზირი #3

ნაშრომში გამოთვლილია მინარევების ელექტრონული სტრუქტურა ნანოსადენებში. მინარევის იონიზაციის ენერგია გამოთვლილია ნანოსადენების რადიუსის სხვადასხვა მნიშვნელობისთვის. ნაშვებია, რომ სივრცული შეზღუდვა დიდ გავლენას ახდენს თხელ დონორებზე, რაც გამოიხატება მათი იონიზაციის ენერგიის მკვეთრ ზრდაში.

ჩვენ განვიხილეთ ცილინდრული ფორმის თუთიის ოქსიდის ნანოსადენში მოთავსებულ კულონურ მინარევთან ბმული ელექტრონი. ნანოსადენის სიგრძე ჩათვლილია უსასრულოდ, ხოლო მისი რადიუსია  $a_0$ . პოტენციალური ენერგია ნანოსადენის გარეთ უსასრულოდ არის ჩათვლილი. ჩვენი მიზანია ამოვხსნათ შრედიანგერის განტოლება, რომელსაც ცილინდრულ კოორდინატებში აქვს სახე:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{q_0 e^2}{\epsilon \sqrt{z^2 + \rho^2}} \right) \Psi(\rho, z, \varphi) = E \Psi(\rho, z, \varphi) \quad (1)$$

(1)-ში  $q_0$  არის მინარევის მუხტი,  $\epsilon$  - მასალის სტატიკური დიელექტრიკული შეღწევადობა,  $m^*$  - ელექტრონის ეფექტური მასა;  $E$  - ელექტრონის ენერგია ათვლილი მოცულობითი კრისტალის გამტარობის ზონის ქვედა საძღვრიდან.

(1) განტოლების ამოსახსნელად, რეალური პოტენციალი ჩანაცვლებულია ჩამოჭრილი კულონური პოტენციალით  $2q/(|z|+a)$ . განსხვავება რეალურ ჰამილტონიანთან  $V = q/(|z|+a) - q/\sqrt{z^2 + \rho^2}$  გათვალისწინებულია პირდაპირი დიაგონალიზაციის საშუალებით. გამოთვლებმა აჩვენა, რომ სივრცული შეზღუდვა ძლიერ გავლენას ახდენს მხოლოდ თხელ დონორებზე.  $a_0 = 1$  ნმ რადიუსის მქონე ნანოსადენში იმ დონორული მინარევის იონიზაციის ენერგია, რომლის ძირითადი მდგომარეობა მოცულობით კრისტალში მოთავსებულია გამტარობის ზონის კიდიდან 50მეგ-ით ქვემოთ, გაზრდილია 234 მეგ-მდე. იონიზაციის ენერგია აღემატება მოცულობით მნიშვნელობას  $a_0 = 7$  ნმ-მდე.

ღრმა დონორების შემთხვევაში სივრცული შეზღუდვის გავლენა მინარევის ელექტრონულ სტრუქტურაზე სუსტია. ჩვენ გამოვთვალეთ ენერგეტიკული სპექტრი დონორული მინარევებისათვის, რომელთა მოცულობითი იონიზაციის ენერგია 200 მეგ-ია. აღმოჩნდა, რომ 1 ნმ რადიუსის ნანოსადენებისთვის იონიზაციის ენერგია მხოლოდ 30 მეგ-ით აღემატება მოცულობით მნიშვნელობას. აქცეპტორული მინარევებისათვის სივრცული შეზღუდვა მნიშვნელოვანია მხოლოდ მცირე რადიუსის ნანოსადენებისთვის. 2 ნმ რადიუსის ნანოსადენებისთვის იონიზაციის ენერგია უკვე უტოლდება მოცულობით მნიშვნელობას. თუ გავითვალისწინებთ იმას, რომ აქცეპტორული დეფექტები თუთიის სულფიდში ჩვეულებრივ ღრმა, მაშინ როცა მაკომპენსირებელი დონორები თხელია, მოსალოდნელია, რომ რადიუსის გარკვეული მნიშვნელობისთვის კომპენსაციის პროცესები შესაძლებელია დათრგუნულ იქნას.