

С.И. Покутний, П.П. Горбик

ИСКУССТВЕННЫЕ АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Институт химии поверхности им. А.А. Чуйко Национальной академии наук Украины
ул. Генерала Наумова, 17, Киев, 03164, Украина, E-mail: pokutnyi_serger@inbox.ru

Обзор посвящен рассмотрению современного состояния исследований искусственных атомов (квазиатомных наногетероструктур) и более сложных наноструктур на их основе – искусственных молекул, а также перспектив развития указанного нового научного направления.

Ключевые слова: искусственные атомы, искусственные молекулы, наногетероструктуры, квантовые точки, электрон, дырка, энергетический спектр

ВВЕДЕНИЕ

Для развития нанофизики и нанохимии плодотворной является идея «искусственного атома» (или сверхатома) [1–3]. Сверхатом (квазиатомная наногетероструктура) состоит из ядра (квантовой точки (КТ)) радиуса a , в объеме которого содержится полупроводниковый (или диэлектрический) материал; ядро окружено диэлектрической (полупроводниковой) матрицей [2–8]. Электронам в сверхатоме соответствуют определенные орбитали, локализованные в окрестности ядра (КТ). Термин «искусственный атом» является правомочным, если учесть дискретную (линейчатую) природу спектров электронных состояний сверхатомов и природных атомов [9], а также подобие их химической активности [10].

Исследованиям квазинульмерных наносистем (НС), состоящих из нанокристаллов сферической формы – так называемых КТ с радиусами $a = 1–10$ нм, содержащих в своем объеме полупроводники (CdS, CdSe, GaAs, Ge, Si, ZnSe) и диэлектрики (Al_2O_3), выращенных в диэлектрических (полупроводниковых) матрицах, уделяется повышенное внимание в связи с их уникальными фотолюминесцентными свойствами, способностью эффективно излучать свет в видимом или близком инфракрасном диапазонах при комнатной температуре [11–21]. Оптические и электрооптические свойства таких квазинульмерных НС (которые в ряде случаев обнаруживают свойства сверхатомов) в

значительной мере определяются энергетическими спектрами пространственно – ограниченных квазичастиц (электронов, дырок, экситонов, биэкситонов, фононов, поляронов, позитронов, позитрониев и т.п.) [2–8].

Возникающие в гетерогенных структурах неоднородности (которые можно рассматривать как наночастицы и нанокластеры), обусловленные, в частности, флуктуациями концентрации легирующей примеси и химического состава, условиями синтеза в многокомпонентных системах, играет особую роль в нанофизических и нанохимических процессах формирования сверхатомов [1–4]. Локализация носителей заряда над поверхностями таких неоднородностей при определенных условиях приводит к образованию искусственных атомов [2–8]. Образование таких сверхатомов сопровождается возникновением в электронных спектрах НС акцепторных уровней, природа которых в большинстве случаев неизвестна, а также резким падением подвижности носителей зарядов в НС [13–21]. Например, в экспериментальных работах [18, 19] установлен акцепторный характер наночастиц $Ag_m(Ag_mS)_n$ в фотоэмульсиях.

Настоящий обзор посвящен рассмотрению существующих теоретических подходов к описанию искусственных атомов и более сложных наноструктур на их основе – искусственных молекул, предложенной новой модели искусственного атома, объясняющей его электронные и оптические свойства, а

также перспектив развития этого нового научного направления.

ИСКУССТВЕННЫЕ АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ В НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

При исследовании оптических свойств образцов стекол с КТ сульфида кадмия и селенида цинка в экспериментальной работе [13] обнаружено, что электрон может локализоваться над поверхностью КТ, а дырка при этом движется в объеме КТ. В [14, 15] экспериментально исследовались НС, состоящие из КТ оксида алюминия, выращенных в диэлектрических матрицах. Поскольку значения ширины запрещенных зон диэлектрических матриц (порядка 3.3 эВ) меньше ширины запрещенной зоны КТ оксида алюминия (7.2 эВ), то существует вероятность стекания электрона из объема КТ в матрицу и локализации электрона в потенциальной яме над поверхностью КТ (дырка при этом движется в объеме КТ). Таким образом, в работах [13–15], по-видимому, впервые экспериментально установлено возникновение искусственных атомов, в качестве ядер содержащих КТ сульфида кадмия, селенида цинка и оксида алюминия, помещенных в диэлектрические матрицы.

В [2–8] изложены основы новой модели искусственного атома, представляющей собой квазинульмерную НС, состоящую из сферической КТ (ядро сверхатома) радиуса a , которая содержит в своем объеме полупроводник (диэлектрик) с диэлектрической проницаемостью (ДП) ε_2 , окруженную диэлектрической матрицей с ДП ε_1 (при относительной ДП $\varepsilon = (\varepsilon_2/\varepsilon_1) \gg 1$). В объеме КТ движется дырка h с эффективной массой m_h , а электрон e с эффективной массой $m_e^{(1)}$ находится в диэлектрической матрице. В такой НС нижайший электронный уровень расположен в матрице, а нижайший дырочный уровень находится в объеме КТ. Большой сдвиг валентной зоны (порядка 700 мэВ) вызывает локализацию дырок в объеме КТ. Большой сдвиг зоны проводимости (порядка 400 мэВ) является потенциальным барьером для электронов (электроны движутся в матрице и не проникают в объем КТ) [13–15]. Энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, а также энергия поляризационного взаимодействия электрона с поверхностью

раздела (КТ–матрица) (поскольку ДП ε_2 КТ намного превосходит ДП ε_1 матрицы) образуют потенциальную яму, в которой локализуется электрон над поверхностью КТ [5–8].

В работах [5–8], в рамках модифицированного метода эффективной массы [22], развита теория сверхатома из пространственно-разделенных электронов и дырок (дырка находится в объеме КТ, а электрон локализован над сферической поверхностью раздела (КТ–матрица)). В качестве ядра выступают КТ, содержащие в своем объеме полупроводники и диэлектрики. Энергетический спектр сверхатома, начиная со значения критического радиуса КТ $a \geq a_c^{(1)}$ (порядка 4 нм), будет полностью состоять с квантоворазмерных дискретных уровней. Такой сверхатом назовем водородоподобным [2–8]. Локализованный над поверхностью КТ электрон является аналогом валентного. Квантоворазмерные дискретные уровни энергий сверхатома при этом, расположены в запрещенных зонах матриц (диэлектрических или полупроводниковых). Электронам в сверхатоме соответствуют определенные орбитали, локализованные в окрестности ядра (КТ) [2–8]. В качестве ядра выступают КТ, содержащие в своем объеме полупроводники и диэлектрики. Энергии ионизации сверхатомов принимают большие значения (порядка 3 эВ), которые почти на три порядка превышают энергии связи экситонов в полупроводниках [2–8].

С ростом радиуса a КТ так, что $a \gg a_{ex}^0$, где

$$a_{ex}^0 = \frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \cdot \frac{\hbar^2}{\mu_0 e^2} \quad (1)$$

боровский радиус двумерного электрона, $\mu_0 = m_e^{(1)}m_h / (m_e^{(1)} + m_h)$ – приведенная масса электронно-дырочной пары (из пространственно-разделенными дыркой и электроном), сферическая поверхность раздела (КТ – матрица) переходит в плоскую поверхность раздела. В таком искусственном атоме электрон, локализованный над поверхностью (КТ–матрица), становится двумерным [5–8]. В потенциальную энергию гамильтониана, описывающего движение электрона в сверхатоме, основной вклад при этом вносит энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой [5–8]:

$$V_{eh}(r) = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\epsilon_1} + \frac{1}{\epsilon_2} \right) \frac{e^2}{r} \quad (2)$$

(r – расстояние электрона от центра КТ). Энергия поляризационного взаимодействия дырки и электрона со сферической поверхностью раздела (КТ–матрица) дает существенно меньший вклад в потенциальную энергию гамильтониана. Таким вкладом в первом приближении можно пренебречь [5–8]. Энергетический спектр двумерного электрона в искусственном атоме принимал кулоновский вид [5–8]:

$$E_n = -\frac{Ry_{ex}^0}{(n + (1/2))^2}, \quad Ry_{ex}^0 = \frac{(\epsilon_1 + \epsilon_2)^2}{4\epsilon_1^2\epsilon_2^2} \cdot \left(\frac{\mu_0}{m_0} \right) Ry_0, \quad (3)$$

где $n = 0, 1, 2$ – главное квантовое число экситона, $Ry_0 = 13.606$ эВ – постоянная Ридберга. Энергия связи основного состояния двумерного электрона, согласно (3), определяется выражением:

$$E_{ex}^0 = -4Ry_{ex}^0. \quad (4)$$

Под энергией связи (4) основного состояния электрона подразумевается энергия, необходимая для распада связанного состояния электрона и дырки (в состоянии с $n = 0$) в сверхатоме.

Из зависимости энергии связи $E_{ex}(a, \epsilon)$ основного состояния электрона в сверхатоме (полученной в [5–8] вариационным методом), содержащем КТ ZnSe радиусом a следует, что связанное состояние электрона возникает вблизи сферической поверхности раздела (КТ–матрица), начиная со значения критического радиуса КТ $a \geq a_c^{(1)} = 3.84$ нм. Дырка при этом движется в объеме КТ, а электрон локализован над сферической поверхностью раздела (КТ–матрица). В этом случае энергия кулоновского взаимодействия $V_{eh}(r)$ (2) между электроном и дыркой, а также энергия поляризационного взаимодействия электрона и дырки со сферической поверхностью раздела (КТ–матрица) преобладают над энергией размерного квантования электрона и дырки в искусственном атоме. Таким образом, в [5–8] установлено, что возникновение сверхатома носит пороговый характер, и возможно лишь начиная с радиуса КТ $a \geq a_c^{(1)} = 3.84$ нм.

С ростом радиуса a КТ наблюдалось увеличение энергии связи основного состояния электрона в сверхатоме. В интервале радиусов $4.0 \leq a \leq 29.8$ нм энергия связи основного состояния электрона в сверхатоме существенно превышает (в 4.1–76.2 раз) значение энергии связи экситона $\tilde{E}_{ex}^0 \approx 21.07$ мэВ в монокристалле селенида цинка [5–8]. Начиная с радиуса КТ $a \geq a_c^{(2)} = 29.8$ нм, энергия связи основного состояния электрона в сверхатоме асимптотически следуют к значению $E_{ex}^0 = -1.5296$ эВ, характеризующему энергию связи основного состояния двумерного электрона в искусственном атоме (4) [5–8].

Эффект существенного увеличения энергии связи основного состояния электрона в сверхатоме, в основном, определялся двумя факторами [5–8]: 1) существенным увеличением энергии кулоновского взаимодействия $|V_{eh}(r)|$ (2) электрона с дыркой (эффект «диэлектрического усиления»); 2) пространственным ограничением области квантования объемом КТ, при этом с увеличением радиуса a КТ, начиная с радиуса КТ $a \geq a_c^{(2)} = 52a_{ex}^0 = 29.8$ нм сверхатом становится двумерным с энергией связи основного состояния E_{ex}^0 (4), значение которой почти на два порядка превышает энергию связи экситона в монокристалле селенида цинка.

Эффект «диэлектрического усиления» обусловлен тем, что в случае, когда ДП матрицы ϵ_1 значительно меньше, чем ДП КТ ϵ_2 , существенную роль во взаимодействии между электроном и дыркой в сверхатоме играет поле, создаваемое этими квазичастицами в матрице. При этом, взаимодействие между электроном и дыркой в сверхатоме оказывается значительно больше, чем в полупроводнике с ДП ϵ_2 [5–8].

В [13] исследовались оптические свойства образцов боросиликатного стекла, содержащих КТ селенида цинка. Согласно рентгенографическим измерениям, средние радиусы \bar{a} КТ ZnSe, находились в диапазоне $\bar{a} \approx 2.0$ –4.8 нм. При малых концентрациях КТ ($x = 0.003$ %) их взаимодействием можно пренебречь. Оптические свойства таких НС в основном определялись энергетическими спектрами электрона и дырки, локализованных вблизи сферической поверхности одиночных КТ, выращенных в матрице стекла. В [13] обнаружен максимум (пик) спектра низкотемпературной люминесценции

$\bar{E} = 2.66$ эВ при температуре $T = 4.5$ К, который находился ниже потолка запрещенной зоны ($E_g = 2.823$ эВ) монокристалла селенида цинка. Сдвиг пика \bar{E} спектра низкотемпературной люминесценции, по отношению к ширине запрещенной зоны монокристалла ZnSe в коротковолновую область, равнялся $\Delta\bar{E} = \bar{E} - E_g = -165$ мэВ.

Сравнивая энергию основного состояния электрона ($E_0(a, \varepsilon) - E_g$) в искусственном атоме со значением пика спектра люминесценции $\Delta\bar{E} = -165$ мэВ, в [5–8] был получен средний радиус $\bar{a}_0 \cong 4.22$ нм КТ селенида цинка, который находился в диапазоне средних радиусов ($\bar{a} \approx 2.0$ – 4.8 нм) КТ, исследованных в условиях экспериментов [13]. Таким образом, предложенная нами модель сверхатома позволила интерпретировать механизм возникновения пика спектра люминесценции $\Delta\bar{E} = -165$ мэВ наносистемы, исследованной в экспериментальной работе [13].

При сближении двух (и более) искусственных атомов между ними устанавливаются взаимодействия ван-дер-ваальсового типа, благодаря которым, начиная с некоторого критического расстояния r_0 , система сверхатомов приобретает устойчивость. Можно предположить, что дальнейшее уплотнение системы, вплоть до некоторого другого критического значения D_c между поверхностями КТ, например, меньшего величины двух боровских радиусов электрона в сверхатоме, приведет к перекрытию внешних электронных орбиталей сверхатомов (при этом интеграл перекрытия внешних электронных волновых функций принимает существенное значение) и возникновению обменных взаимодействий и, следовательно, более сильного типа связи [2–8, 23]. В результате могут создаваться условия для возникновения из искусственных атомов новых квантовых наносистем – квазимолекул (искусственных молекул) [4, 8, 23].

Указанный тип связи является новым, несмотря на обменный характер, он может реализоваться на длинах, гораздо больших характерных длин для известных природных молекул. Действительно, интеграл перекрытия внешних электронных волновых функций в квазимолекуле принимает существенное значение на расстояниях, на порядок и более превосходящих характерные длины для

известных природных молекул [5–8, 23]. Такое усиление энергии связи в квазимолекуле обусловлено тем, что основной вклад в энергию связи вносит энергия обменного взаимодействия электронов, перенормированная кулоновским и поляризационным взаимодействиями пространственно-разделенных электронов и дырок.

Можно предположить также, что указанные выше условия образования искусственных молекул могут быть обеспечены воздействием и других факторов, например, внешних физических полей. В пользу этого предположения свидетельствуют результаты работы [11, 12, 17, 24], в которой возникновение эффективного взаимодействия между двумя искусственными атомами на значительных расстояниях в условиях воздействия электромагнитного поля наблюдалось экспериментально.

В результате сближении двух сверхатомов, представляющих собой КТ сульфида кадмия с локализованными над поверхностями КТ валентными электронами, начиная с некоторого критического расстояния D_c между поверхностями ядер (КТ), атомные орбитали двух валентных электронов перекрываются (при этом значения интеграла перекрытия внешних электронных волновых функций принимает существенное значение) и образуют связь. В результате возникает квазимолекула [4, 8, 23]. Такая связь является новым типом химической связи в квазимолекуле. Полная энергия $E_0(\bar{D}, \bar{a})$ основного синглетного состояния квазимолекулы в наносистеме принимала вид [4, 8, 23]:

$$E_0(\bar{D}, \bar{a}) = 2E_{ex}(\bar{a}) + E_B(\bar{D}, \bar{a}), \quad (5)$$

где $E_B(\bar{D}, \bar{a})$ – энергия связи основного синглетного состояния квазимолекулы, а энергия связи $E_{ex}(\bar{a})$ основного состояния искусственного атома (из пространственно – разделенных электрона и дырки), локализованного над поверхностью КТ, найдена в [5–8] (параметры

$$\bar{D} = (D / (a_{\downarrow} ex^{\uparrow} 0)), \quad \bar{a} = (a / (a_{\downarrow} ex^{\uparrow} 0)).$$

Результаты вариационного расчета энергии связи $E_B(\bar{D}, \bar{a})$ основного синглетного состояния квазимолекулы в НС, содержащей

КТ сульфида кадмия, со средними радиусами $a_1 = 3,25$ нм, (ДП $\varepsilon_2 = 9.3$, эффективная масса дырки в КТ ($m_h/m_0 = 5$), выращенных в матрице боросиликатного стекла (ДП $\varepsilon_1 = 2$, эффективная масса электрона в матрице была вычислена в [25] и равнялась ($m_e^{(1)}/m_0 = 0.537$)), которая исследовалась в экспериментальной работе [13], показаны на рис. 1 [5, 6]. В [13] исследовались образцы боросиликатных стекол, легированных сульфидом кадмия с концентрациями от $x = 0.003\%$ до 1% . При концентрациях КТ, начиная с ($x \cong 0.6\%$), необходимо учитывать взаимодействие носителей заряда, локализованных над поверхностями КТ.

Энергия связи $E_B(\tilde{D}, \tilde{a})$ основного синглетного состояния квазимолекулы в НС, содержащей КТ сульфида кадмия со средними радиусами $a_1 = 3.25$ нм, имела минимальное значение $E_B^{(1)}(D_1, \bar{a}_1) \approx -6,84$ мэВ (при расстоянии $D_1 \cong 3.0$ нм) (см. рис. 1) ($E_B^{(1)}$ отвечает критической температуре $T_c \approx 79$ К) [4, 8, 23]. Из рис. 1 следует, что квазимолекула в НС возникает, начиная с расстояния $D \geq D_c^{(1)} \cong 2.1$ нм между поверхностями КТ. Образование такой квазимолекулы носит пороговый характер и возможно лишь в НС, содержащей КТ со средними радиусами \bar{a}_1 , в

которой расстояние D между поверхностями КТ превышает значение некоторого критического расстояния $D_c^{(1)}$ [4, 8, 23].

Значение энергии связи $E_{ex}(\tilde{a})$ сверхатома $E_{ex}(\bar{a}_1) \cong -98$ мэВ [5–8]. При этом энергия основного синглетного состояния квазимолекулы (5) принимала значение $E_0(\tilde{D}, \bar{a}_1) \approx -202.84$ мэВ [4, 8, 23]. Следует подчеркнуть, что критерий применимости использованного нами вариационного расчета энергии связи $E_B(\tilde{D}, \tilde{a})$ квазимолекулы выполнялся (отношение $(E_B^{(1)}(D_1, \bar{a}_1) / E_{ex}(\bar{a}_1)) \cong 0.07$).

С увеличением расстояния D между поверхностями КТ, начиная со значения $D \geq D_c^{(2)} = 4.4$ нм, квазимолекула в НС распадалась на два сверхатома (см. рис. 1) [4, 8, 23]. Таким образом, квазимолекула в НС может возникнуть при выполнении условия $D_c^{(1)} \leq D \leq D_c^{(2)}$. Кроме того, квазимолекула может существовать только при температурах, ниже некоторой критической температуры $T_c = 79$ К. Биэкситон (экситонная квазимолекула) возникал в монокристалле CdS с энергией связи $E_g = 0.59$ мэВ (при температуре 6.84 К). Энергия связи $E_g^{(1)}$ квазимолекулы в наносистеме при этом превышает E_g больше чем на порядок [4, 9, 23].

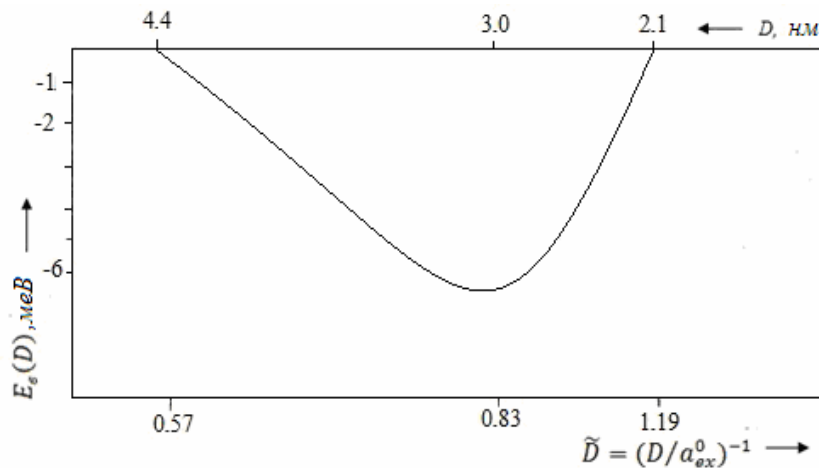


Рис. 1. Зависимость энергии связи основного синглетного состояния $E_g(a, D)$ квазимолекулы (состоящей из двух сферических КТ сульфида кадмия со средними радиусами $a_{\downarrow 1} = 3,25$ нм) от расстояния D между поверхностями КТ. Здесь $a_{ex}^0 = 2.5$ нм – борковский радиус электрона в сверхатоме

В энергию связи квазимолекулы, как следует из результатов вариационных расчетов [4, 9, 23], основной вклад вносит энергия обменного взаимодействия электронов с дырками, который существенно больше вклада энергии кулоновского взаимодействия электронов с дырками (т.е. отношение ≤ 0.11). Выполненные расчеты энергии связи основного состояния квазимолекулы в НС являются вариационными, поэтому могут давать заниженные значения энергии связи $E_B(\tilde{D}, \tilde{a})$.

Таким образом, обнаружено существенное увеличение энергии связи основного синглетного состояния квазимолекулы (из пространственно-разделенных электронов и дырок) в НС (больше чем на порядок), по сравнению с энергией связи биэкситона в монокристалле сульфида кадмия [4, 8, 23]. Оно обусловлено тем, что благодаря наличию в НС поверхности раздела (КТ–матрица) энергия обменного взаимодействия электронов с дырками (перенормированная кулоновским взаимодействием (2) пространственно-разделенных электронов и дырок) в НС, гораздо больше энергии обменного взаимодействия электронов с дырками в монокристалле [4, 8, 23].

Следует отметить, что в экспериментальной работе [13], по-видимому, впервые было обнаружено взаимодействия носителей заряда, локализованных над поверхностями КТ сульфида кадмия, а предложенная нами модель квазимолекулы [4, 8, 23] позволила интерпретировать механизм возникновения пика спектра поглощения наносистемы, исследованной в [13].

В атоме щелочного металла валентный электрон движется в кулоновском поле атомного остова [26], имеющего такую же функциональную зависимость от r , как и кулоновское поле (2), в котором находится валентный электрон в модели водородоподобного искусственного атома [2–9]. Это обстоятельство приводит к тому, что энергетические спектры валентного электрона в атоме щелочного металла и в искусственном атоме (3) описываются спектром водородоподобного типа [2–8, 26]. При этом число возможных квантово-размерных состояний валентного электрона в модели водородоподобного искусственного атома

такое же, как и число квантовых дискретных состояний валентного электрона в атоме щелочного металла [2–9, 23, 26].

В [4, 8] приведены положения энергетических уровней валентного электрона в атомах щелочных металлов (K, Rb, Cs, Fr) [26] и в новом искусственном атоме X, а также сдвиги уровней валентного электрона относительно соседнего уровня. В [4, 8] предполагалось, что сдвиг энергетического уровня E_x искусственного атома X (относительно энергетического уровня E_{Fr} атома Fr) будет таким же, как и сдвиг энергетического уровня E_{Cs} атома Cs (относительно энергетического уровня E_{Fr} атома Fr). Тогда уровень валентного электрона искусственного атома принимал значение $E_x = -593$ мэВ. Используя зависимость энергии связи $E_{ex}(a, \epsilon)$ основного состояния электрона в искусственном атоме, полученную в [5, 6] вариационным методом, содержащем КТ селенида цинка радиусом a , в [4, 9] найден радиус КТ селенида цинка $a_1 = 5.4$ нм, который соответствовал уровню $E_x = -593$ мэВ. Следует отметить, что энергетические уровни валентного электрона в атомах щелочных металлов (K, Rb, Cs, Fr) [26] и в новом искусственном атоме X расположены в инфракрасной области спектра [4, 8].

Таким образом, предложенная нами в [2–9] новая модель искусственного атома позволила предсказать новую наноструктуру – искусственный атом, аналог природного из группы щелочных металлов, следующего за францием и отсутствующего в периодической системе Д.И. Менделеева [4, 8].

Кратко остановимся на отличиях спектроскопии искусственных [5–8] и природных водородоподобных атомов [26]:

1. В возникновении искусственного атома и существенном увеличении энергии связи основного состояния искусственного атома кардинальную роль играет поверхность раздела (КТ–матрица). Характерной особенностью возникновения электронных состояний в таких сверхатомах (т.е. образование самих сверхатомов) является существование критического размера наночастицы a_c (порядка 5 нм). В связи с этим необходимо отметить, что для веществ, которые способны образовывать атомы, должна существовать область размеров сферических наночастиц

$$a_a < a < a_c,$$

где a_a имеет атомные размеры, в которой невозможно образование сверхатомов. Поэтому возможность непрерывного перехода от состояний обычного атома к состояниям сверхатомов, может осуществляться лишь при некоторых условиях, связанных либо с проникновением носителя заряда через границу раздела (наночастица–матрица) в приповерхностный слой, либо при атомных размерах a_c (порядка одного нм), при которых проведенное выше рассмотрение неприменимо.

2. Дальняя асимптотика потенциальной энергии электрона (r^{-4}) приводит к существованию конечного числа энергетических уровней в сверхатоме. Изменяя радиус a КТ, можно направлено получать сверхатомы с наперед заданным числом энергетических квантоворазмерных уровней. Это обстоятельство может быть использовано для получения НС, содержащих всего два уровня. Такие двухуровневые НС актуальны в качестве активной области нанолазеров, а также в элементах памяти оптических компьютеров.

3. Изменяя радиус a КТ, можно получать переходы между квантоворазмерными уровнями в сверхатоме с наперед заданными энергиями, расположенными в диапазоне от инфракрасной до ультрафиолетовой области спектра.

ПЕРСПЕКТИВЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ИСКУССТВЕННЫХ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

Обнаруженные в сверхатомах особенности локальных зарядовых состояний, обусловленные зависимостью их энергии связи от размеров наночастиц и существование критического размера наночастицы могут представлять интерес для разработки новых методов спектроскопического контроля ультрадисперсных сред. Особую заинтересованность представляет разработка таких методов, например, для контроля образования зародышей новых фаз при

радиационных, электромагнитных и тепловых воздействиях на многокомпонентные системы, особенностей синтеза в экстремальных условиях и т.п. [2–8, 27, 28].

Приведенные результаты свидетельствуют о принципиальной возможности создания искусственных атомов, в том числе аналогов природных, с новыми физическими и химическими свойствами [2–8]. На их основе возможно построение новых квазиатомных квантовых наносистем [2–8, 23] – квазимолекул и квазикристаллов, управление симметрией и периодом решетки которых позволит реализовать уникальные физические и химические эффекты и явления, создать новые принципы в материаловедении.

Установлено существенное увеличение энергии связи электрона в водородоподобных сверхатомах [5–8] (почти на два порядка больше, чем в закрытых наносистемах, в которых электроны и дырки локализованы в объеме КТ). Такой эффект позволит использовать искусственные атомы в качестве активной среды нанолазеров, излучающих в оптическом и инфракрасном диапазонах спектра [27], и работающих на экситонных переходах при комнатных температурах, элементной базы квантовых нанокomпьютеров и т.п. [5, 6].

ВЫВОДЫ

Научное направление, относящееся к физике, химии и технологии искусственных атомов является новым и разрабатывается как актуальное и перспективное в ведущих научных лабораториях мира. В Институте химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины впервые предложена и теоретически исследована новая модель искусственного атома – наноразмерной гетероструктуры из пространственно-разделенными электро-нами и дырками; разрабатываются подходы к построению новых уникальных квазиатомных квантовых наносистем – искусственных атомов, искусственных молекул и искусственных кристаллов.

Штучні атоми і молекули: сучасний стан і перспективи досліджень

С.І. Покутній, П.П. Горбик

*Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка Національної академії наук України
вул. Генерала Наумова, 17, Київ, 03164, Україна, pokutnyi_serгей@inbox.ru*

Огляд присвячено розгляду сучасного стану досліджень штучних атомів (квазіатомних наногетероструктур) та більш складних наноструктур на їх основі – штучних молекул, а також перспектив розвитку вказаного наукового напрямку.

Ключові слова: *штучні атоми, штучні молекули, наногетероструктури, квантові точки, електрон, дірка, енергетичний спектр*

Artificial atoms and molecules: current state and future researches

S.I. Pokutnyi, P.P. Gorbyk

*Chuiko Institute of Surface Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine
17 General Naumov Str., Kyiv, 03164, Ukraine, pokutnyi_serгей@inbox.ru*

This review discusses the current state of research of artificial atoms (quasi-atomic nanoheterostructures) and more complex nanostructures based on them – synthetic molecules, a new model of an artificial atom proposed, satisfactorily explaining its electronic properties, as well as the prospects for the development of the new scientific field.

Keywords: *artificial atoms, artificial molecules, heterostructures, quantum dots, electron, hole, the energy spectrum*

ЛИТЕРАТУРА

1. Ashoori R.C. Electrons in artificial atoms // *Nature*. – 1996. – V. 379, N 6564. – P. 413–419.
2. Покутній С.І., Горбик П.П. Електронні свойства наноразмерних квазіатомних структур // *Успехи физ. мет.* – 2013. – Т. 14, № 4. – С. 353–378.
3. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Superatoms in quasi-zero-dimensional nanostructures // *J. Applied Chem.* – 2013. – V. 1, N 1. – P. 44–47.
4. Pokutnyi S.I. Exciton formed from spatially separated electrons and holes in dielectric quantum dots // *Journal of Advances in Chemistry*. – 2015. – V.11, N 10. – P.3848–3852.
5. Pokutnyi S.I. Binding energy of the exciton of a spatially separated electron and hole in quasi-zero-dimensional nanosystems // *Tech. Phys. Lett.* – 2013. – V. 39, N 3. – P. 233–235.
6. Pokutnyi S.I. On an exciton with a spatially separated electron and hole in quasi-zero-dimensional nanostructures // *Semiconductors*. – 2013. – V. 47, N 6. – P. 791–798.
7. Pokutnyi S.I. Binding energy of excitons formed from spatially separated electrons and holes in insulating quantum dots // *Semiconductors*. – 2015. – V. 49, N 10. – P.1311–1315.
8. Pokutnyi S.I. Theory of excitons and excitonic quasimolecules formed from spatially separated electrons and holes in quasi-zero-dimensional nanosystems // *Optics*. – 2014. – V. 3, N 6–1. – P. 10–21.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – Москва: Наука. – 1974. – 752 с.
10. Малыгин А.А., Смирнов В.М. Химия высокоорганизованных веществ // *Известия С.-Пб. гос. техн. и-та (техн. унив.)*. – 2012. – Т. 15, № 41. – С. 102–107.
11. Lalumiere K., Sanders B.C., van Loo A.F. et al. Input-output theory for waveguide QED with an ensemble of inhomogeneous atoms // *Phys. Rev. A*. – 2013. – V. 88, N 10. – P. 43806–43811.

12. Loo F.V., Fedorov A., Lalumiere K. et al. Photon-mediated interactions between distant artificial atoms // *Science*. – 2013. – V. 342, N 6165. – P. 1494–1496.
13. Bondar N.V., Brodyn M.S. Optical properties of semiconductor nanostructures // *Physics E*. – 2010. – V. 4, N 10. – P. 1549–1555.
14. Dzyuba V.P., Krasnok A.E., Kulchin J.N. Optical properties of the dielectric nanoparticles inserted into a dielectric matrix // *Tech. Phys. Lett.* – 2010. – V. 36, N 21. – P. 1–9.
15. Kulchin J.N., Dzyuba V.P. Nonoptical properties of the dielectric nanoparticles inserted into a dielectric matrix // *Rac. Sci. Rev.* – 2010. – V. 12, N 1. – P. 102–105.
16. Bulavin L. Thermophysical properties of carbon nanotubes in toluene under high pressure // *J. Mol. Liq.* – 2009. – V. 150, N 7. – P. 1–3.
17. Malyukin Y.V. Activation nanocrystals dielectric // *Radiat. Meas.* – 2010. – V. 4, N 3. – P. 589–594.
18. Латышев А.Н., Овчинников О.В., Смирнов М.С. Особенности переноса заряда при взаимодействии молекул сенсализаторов с нанокристаллами // *Журнал приклад. спектроскопии*. – 2011. – Т. 78, № 3. – С. 481–484.
19. Суворова Т.И., Латышев А.Н., Овчинников О.В., Смирнов М.С. Усиление люминесценции молекул красителей в присутствии серебряных наночастиц // *Оптический журнал*. – 2012. – Т. 79, № 1. – С. 79–82.
20. Borysenko M.V., Bogatyrev V.M., Poddenezhny N.V. et al. Application of chromium-containing silica for synthesising functional glasslike materials by the sol-gel method // *J. Sol-Gel Sci. Technol.* – 2004. – V. 32, N 3. – P. 327–331.
21. Борисенко Н.В., Сулим И.Я., Борисенко Л.И. Модифицирование высокодисперсного кремнезема ацетилацетонатом циркония // *Теорет. эксперим. химия*. – 2008. – Т. 44, № 3. – С. 191–195.
22. Pokutnyi S.I. Exciton states in semiconductor quantum dots in framework of the modified effective mass method // *Semiconductors*. – 2007. – V. 41, N 11. – P. 1323–1400.
23. Pokutnyi S.I. Biexcitons formed from spatially separated electrons and holes in quasi-zero-dimensional nanosystems // *Semiconductors*. – 2013. – V. 47, N 12. – P. 1626–1635.
24. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Quasi-zero-dimensional nanostructures: Excitonic quasimolecules // *J. Appl. Chem.* – 2014. – V. 2, N 1. – P. 1–4.
25. Pokutnyi S.I. Exciton in quasi-zero-dimensional nanostructures // *Phys. Lett. A*. – 1995. – V. 203, N 5, 6. – P. 388–394.
26. Frish S.E. Optical spectra of atoms. – Moscow: Nauka, 1963. – 640 p.
27. Pokutnyi S.I. Optical nanolaser on the heavy hole transition in semiconductor nanocrystals // *Phys. Lett. A*. – 2005. – V. 42, N 5. – P. 347–352.
28. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Absorption of light in electron states in quasi-zero-dimensional nanostructures // *Optics*. – 2013. – V. 2, N 4. – P. 47–50.

REFERENCES

1. Ashoori R. C. Electrons in artificial atoms. *Nature*. 1996. **379** (6564): 413.
2. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. The electronic properties of quasiatonic nanostructures. *Progress in Physics of Metals*. 2013. **14** (4): 353.
3. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Superatoms in quasi-zero-dimensional nanostructures. *J. Appl. Chem.* 2013. **1**(1): 44.
4. Pokutnyi S.I. Exciton formed from spatially separated electrons and holes in dielectric quantum dots. *J. Advances in Chemistry*. 2015. **11**(10): 3848.
5. Pokutnyi S.I. Binding energy of the exciton of a spatially separated electron and hole in quasi-zero-dimensional nanosystems. *Tech. Phys. Lett.* 2013. **39**(3): 233.
6. Pokutnyi S.I. On an exciton with a spatially separated electron and hole in quasi-zero-dimensional nanostructures. *Semiconductors*. 2013. **47**(6): 791.
7. Pokutnyi S.I. Binding energy of excitons formed from spatially separated electrons and holes in insulating quantum dots. *Semiconductors*. 2015. **49**(10): 1311.
8. Pokutnyi S.I. Theory of excitons and excitonic quasimolecules formed from spatially separated electrons and holes in quasi-zero-dimensional nanosystems. *Optics*. 2014. **3**(1): 10.
9. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Quantum mechanics*. (Moscow: Nauka, 1974).

10. Malygin A.A., Smirnov V.M. Chemistry highly substances. *Proceedings of St.- Petersburg state Technical Institute*. 2012. **15**(41): 102.
11. Lalumiere K., Sanders B.S., Van Loo A.F., Fedorov A., Wallraff A., Blais A. Input-output theory for waveguide QED with an ensemble of inhomogeneous atoms. *Phys. Rev. A*. 2013. **88**(10): 43806.
12. Van Loo A.F., Fedorov A., Lalumiere K., Sanders B.C., Blais A., Wallraff A. Photon-mediated interactions between distant artificial atoms. *Science*. 2013. **342**(6165): 1494.
13. Bondar N.V., Brodyn M.S. Optical properties of semiconductor nanostructures. *Physics E*. 2010. **4**(10): 1549.
14. Dzyuba V.P., Krasnok A.E., Kulchin J.N. Optical properties of the dielectric nanoparticles inserted into a dielectric matrix. *Tech. Phys. Lett.* 2010. **36**(21): 1.
15. Kulchin J.N., Dzyuba V.P. Nonoptical properties of the dielectric nanoparticles inserted into a dielectric matrix. *Pac. Sci. Rev.* 2010. **12**(1): 102.
16. Bulavin L. Thermophysical properties of carbon nanotubes in toluene under high pressure. *J. Mol. Liq.* 2009. **150**(7): 1.
17. Malyukin Y.V. Activation nanocrystals dielectric. *Radiat. Meas.* 2010. **4**(3): 589.
18. Latyshev A.N., Chung N.T.K., Ovchinnikov O.V., Smirnova T.I., Smirnova M.S., Egorushina E.A. Characteristic features of charge transfer in the interaction between sensitizer molecules and AgCl(I) molecules. *J. Appl. Spectrosc.* 2011. **78**(3): 454.
19. Suvorova T.I., Latyshev A.N., Ovchinnikov O.V., Smirnov M.S. Strengthening the luminescence of dye molecules in the presence of silver nanoparticles. *J. Opt. Technol.* 2012. **79**(1): 79.
20. Borysenko M.V., Bogatyrev V.M., Poddenezhny N.V., Boiko A.A., Chuiko A.A. Application of chromium-containing silica for synthesising functional glasslike materials by the sol-gel method. *J. Sol-Gel Sci. Technol.* 2004. **32**(3): 327.
21. Borysenko M.V., Sulim I.Y., Borysenko L.I. Modification of highly dispersed silica with zirconium acetylacetonate. *Theor. Exp. Chem.* 2008. **44**(3): 200.
22. Pokutnyi S.I. Exciton states in semiconductor quantum dots in framework of the modified effective mass method. *Semiconductors*. 2007. **41**(11): 1323.
23. Pokutnyi S.I. Biexcitons formed from spatially separated electrons and holes in quasi-zero-dimensional nanosystems. *Semiconductors*. 2013. **47**(12): 1626.
24. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Quasi-zero-dimensional nanostructures: Excitonic quasimolecules. *J. Appl. Chem.* 2014. **2**(1): 1.
25. Pokutnyi S.I. Exciton in quasi-zero-dimensional nanostructures. *Phys. Lett. A*. 1995. **203**(5–6): 388.
26. Frish S.E. *Optical spectra of atoms*. (Moscow: Nauka, 1963).
27. Pokutnyi S.I. Optical nanolaser on the heavy hole transition in semiconductor nanocrystals. *Phys. Lett. A*. 2005. **342**(5): 347.
28. Pokutnyi S.I., Gorbyk P.P. Absorption of light in electron states in quasi-zero-dimensional nanostructures. *Optics*. 2013. **2**(4): 47.

Поступила 25.09.2014, принята 25.09.2015