

ЗОННА СТРУКТУРА ТА СИЛА ОСЦИЛЯТОРА МІЖПІДЗОННИХ ПЕРЕХОДІВ ЕЛЕКТРОНІВ У НАДГРАТКАХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК РІЗНОЇ ВИМІРНОСТІ

Бойчук В.І., Білінський І.В.*, Пазюк Р.І.***

email: ri.pazyuk@gmail.com

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
*кафедра теоретичної і прикладної фізики та комп'ютерного моделювання

**кафедра інформатики та обчислювальної математики

В роботі досліджуються підбар'єрні електронні стани надгратки сферичних квантових точок GaAs малих розмірів у матриці AlAs. Використовуючи метод сильного зв'язку, проведено теоретичне обчислення електронної зонної структури надгратки GaAs/AlAs з тунельно-зв'язаними КТ. Використано два підходи при обчисленні закону дисперсії електрона НСКТ, коли гібридизацію станів враховано або нею нехтується. Розглянуто надгратки різної вимірності, оптичні властивості яких досліджуються. Зокрема, обчислено ймовірності міжпідзонних електронних переходів та сили осцилятора переходів основного та перших збуджених станів електрона НГ для різних радіусів КТ та відстаней між ними.

Ключові слова: квантова точка, надгратка, електронні стани, густина станів, сила осцилятора.

ВСТУП

Напівпровідникові нанокристали, або квантові точки (КТ), є унікальним класом напівпровідникових часток з розмірами від 2 до 10 нм. У цій області розмірів матеріали проявляють унікальні оптичні і електричні властивості через ефекти розмірного квантування [1]. Напівпровідникові структури з КТ різної форми, які характеризуються рядом виявлених в них явищ і властивостей, представляють інтерес як для проведення фундаментальних досліджень, так і є цікавими для нано- і оптоелектроніки [2]. На відміну від структур з квантовими ямами і дротоми появилась можливість поглинання електромагнітного випромінювання при нормальному падінні світла та відповідні оптичні переходи в площині росту структур з КТ. Внаслідок зниження процесу розсіювання на фонах в системах меншої вимірності, ансамбль КТ характеризується більшим часом

життя нерівноважних носіїв заряду. В ансамблях КТ зменшується швидкість термічної генерації носіїв заряду через дискретність енергетичного спектру, зростає величина сили осцилятора для міжпідзонних та екситонних переходів, що спричинене локалізацією хвильових функцій у всіх трьох напрямках.

На сучасному етапі основні зусилля дослідників напрямлені [3], по-перше, на підвищення однорідності масиву КТ за розмірами зі збереженням єдиної форми і елементного складу КТ; по-друге, на управління просторовим розміщенням КТ для отримання просторово-впорядкованих гранично густих та розріджених до потрібної густини масивів КТ; по-третє, на зменшення густини дефектів – дислокацій та точкових дефектів всередині КТ. Особливу зацікавленість сьогодні викликають КТ малих розмірів (<10 нм), як "штучні" атоми з невеликим чи-

слов зв'язаних станів, які характеризуються значною величиною енергетичної відстані між дискретними рівнями, що забезпечує роботу приладів при кімнатній температурі. Для практичної реалізації достатньо великого значення коефіцієнта підсилення в лазерах, більшої квантової ефективності фотоприймачів, значного зсуву граничної напруги в транзисторних елементах пам'яті і швидкої обробки інформації в квантових мережах – необхідно забезпечити якомога більшу концентрацію електронів у системі.

Оптичні методи дослідження КТ, такі як поглинання, люмінесценція, спектроскопія [4] спрямовані на вивчення як фундаментальних закономірностей фізичних властивостей нульвимірних систем [5], так і на визначення можливих сфер їх практичного застосування [6-10]. Якщо розглядати виключно електронні або діркові стани КТ, то основним інструментом дослідження є методика вимірювання спектрів поглинання, яка характеризує оптичні міжзонні та міжпідзонні переходи. У першому наближенні міжпідзонні переходи між стаціонарними станами електрона і дірки для однорідних параболічних зон були розглянуті в роботі [11], у якій сформульовано правило відбору за орбітальним і радіальним квантовими числами. Розвитком цього підходу стало врахування в моделі виродженості енергетичного спектру валентної зони об'ємного напівпровідника [12].

Крім того, розроблені також інші підходи до моделювання енергетичної структури КТ, які ґрунтуються на наближенні сильного зв'язку [13], напівемпіричного псевдопотенціалу [14] та локального функціонала густини [15].

Переважаюча більшість теоретичних досліджень [16,17] стосуються масиву "невзаємодіючих" КТ. Відстані між КТ набагато перевищують розміри самих КТ. Тому проводиться дослідження спектру квазічастинок окремого елемента масиву. Що ж до теорії енергетичних спектрів та оптичних характеристик основних квазічастинок (електронів, дірок, екситонів) у масивах періодично розташованих тунельно зв'язаних КТ, то таких теоретичних робіт є надзвичайно мало. Розглянемо дещо детальніше це питання.

Дослідження електронної структури масиву тунельно зв'язаних у всіх трьох вимірах

квантових точок проведено у циклі робіт [18-22] для гетероструктур GaN/AlN та InAs/GaAs. При цьому методом теорії збурень враховувалися внутрішні пружні напрути в масиві КТ та ефекти п'єзоелектричної та спонтанної поляризації. Основним недоліком цього методу є його погана збіжність ряду теорії збурень. З метою покращення збіжності в наступних роботах [23-27] пропонується модифікований метод приєднаних плоских хвиль, який коректно враховує складну поведінку хвильових функцій квазічастинок у надгратках. Цим методом досліджено електронні та екситонні стани та їх залежність від геометричних параметрів надграток циліндричних напівпровідникових КТ β -HgS у матриці β -CdS та GaAs у матриці $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. У роботі [28] досліджувався спектр електронів у надгратці КТ еліптичного квантового дроту. Масив вертикально зв'язаних КТ з анізотропною ефективною масою носіїв заряду був апроксимований моделлю надгратки квантових точок, які розташовані у середовищі вздовж еліптичного квантового дроту. Спектр електронів і дірок в одновимірних та двовимірних надгратках (НГ) сферичних КТ GaAs у напівпровідниковій матриці AlAs отримано і проаналізовано в роботах [29, 30]. У наближенні ефективних мас методом приєднаних плоских хвиль виконано розрахунок електронної зонної структури у надгратці сферичних нанокристалів HgS, розміщених у середовищі CdS [31]. Досліджено залежність найнижчої зони енергій від розмірів квантової точки та відстані між найближчими сусідами.

Аналіз наведених та інших робіт [32] показує, що у надграткових структурах виникають нові квазічастинки, що подібні до екситонів в молекулярних чи напівпровідникових кристалах. Відомі декілька спроб теоретичного дослідження колективних збуджень електронної підсистеми. У цих роботах для опису зонних станів екситонів упорядкованих ансамблів квантових точок застосовують модель Кроніга-Пенні [33-36], а також наближення слабого зв'язку [37-40].

Запропонована робота присвячена дослідженню підбар'єрних електронних станів надгратки сферичних квантових точок (НСКТ) малих розмірів. Використовуючи ме-

тод сильного зв'язку, проведено теоретичне обчислення електронної зонної структури надгратки GaAs/AlAs з тунельно-зв'язаними сферичними квантовими точками. Розглянуто надгратки різної вимірності. Досліджено оптичні властивості надграток КТ. Зокрема, обчислено ймовірності міжзідзонних електронних переходів та сили осцилятора переходів основного та перших збуджених станів електрона НГ для різних радіусів КТ та відстаней між ними.

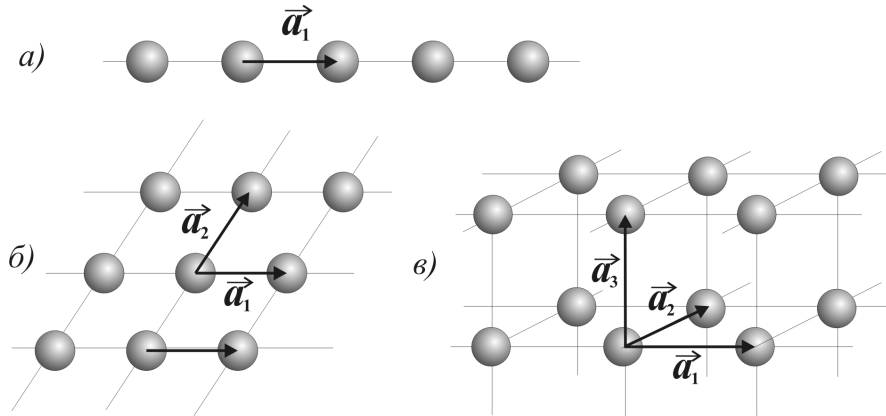


Рисунок 1. Схеми надграток напівпровідникових КТ (матеріал 1) в матриці (матеріал 2) різної вимірності, де $|\vec{a}_n|$ - відстань між центрами КТ в різних напрямках.

Вважатимемо відомими всі геометричні параметри: радіус КТ – R , відстані між центрами КТ – $|\vec{a}_i|$, $i = 1, 2, 3$. При розрахунку спектру електрона розглядаємо гетеросистему, для яких сталі ґратки та діелектричні проникності обох кристалів, з яких вони складаються, є близькими за величинами та використовуємо для електрона в КТ наближення ефективної маси, яке справедливе при не дуже малих радіусах КТ ($R > 2$ нм) [31]. За таких умов ефективні маси електрона в КТ і в матриці (m_1, m_2) є відомими і такими, як у відповідних масивних кристалах. Деформаційними та поляризаційними ефектами на межі поділу середовищ можна знехтувати або врахувати за теорією збурень [29].

Для розрахунку спектра електрона в системі КТ-матриця використовуємо наближення скінченного прямокутного потенціалу, а також будемо вважати, що ефективна маса електрона змінює своє значення на межі поділу у дуже малій області зміни координат. Рівняння Шредінґера для окремо взятої сферичної КТ у цьому наближенні розв'язується точно. Хвильова функція v -го стану запи-

1. СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА У РІЗНОЇ ВИМІРНОСТІ НАДГРАТКАХ СФЕРИЧНИХ КВАНТОВИХ ТОЧОК

Розглядаємо систему, що складається з квантових точок (матеріал 1) сферичної форми, періодично розташованих в напівпровідниковій матриці (матеріал 2). Дослідження проводимо для систем КТ одновимірної (рис.1,а), двовимірної та тривимірної надграток КТ (рис.1б та рис.1в відповідно), які характеризується елементарною коміркою у вигляді ланцюжка, квадрата та прямокутної призми відповідно.

ється у вигляді добутку сферичної та радіальної складових функції. Вигляд останньої залежить від області знаходження частинки [30]:

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \begin{cases} A j_l(kr), & r \leq R \\ B h_l^{(1)}(xr), & r > R \end{cases}. \quad (1)$$

З умов «зшивання», які враховують неперервність хвильової функції, потоку ймовірності, а також умову нормування на одиницю, можна визначити сталі A, B та енергію квантових станів електрона в одній КТ.

Те що основні параметри розглядуваних кристалів гетероструктури близькі, дозволяє вибрати потенціал надгратки $U(\vec{r})$ у вигляді суми потенціалів $V(\vec{r})$ окремих КТ:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} V(\vec{r} - \vec{n}), \quad (3)$$

$$\text{де } V(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq R, \\ 0, & r > R \end{cases},$$

$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ – вектор трансляції надгратки, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Хвильова функція електрона $\psi(\vec{r})$ повинна задовольняти умові періодичності. Скористаємось наближенням сильного зв'язку та шукаємо її у вигляді:

$$\psi_v(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}\vec{n}} \phi_v(\vec{r} - \vec{n}), \quad v = (nlm) \quad (4)$$

$$\psi_\mu(\vec{r}) = \sum_{\vec{n}, v} C_v^\mu e^{i\vec{k}\vec{n}} \phi_v(\vec{r} - \vec{n}), \quad (5)$$

де $\phi_v(\vec{r})$ – власна функція оператора енергії окремо взятої КТ (1), C_v – коефіцієнти розкладу. Формула (5) на відміну від (4) враховує можливе «переміщення» станів електрона, тому μ нумерує "нові" підзони.

Для опису електронного закону дисперсії КТ, як і у випадку багатеелектронних атомів чи молекул [41] будемо вважати кутовий розподіл електронів у р-станах описується хвильовими функціями

$$|p_z\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r};$$

$$|p_x\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \cos \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x}{r};$$

$$|p_y\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta \sin \varphi = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{y}{r}.$$

Залежно від вимірності розглядуваної системи КТ, хвильові функції електрона (4) чи (5) визначаються такими векторами трансляції:

$$\vec{n} = n_1 \vec{a}_1; \quad \vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2; \quad \vec{n} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3.$$

При виборі хвильової функції у вигляді (4) розв'язок рівняння Шредінгера зводиться до знаходження середнього значення гамільтоніана задачі. Рівняння Шредінгера із врахуванням хвильової функції (5) запишеться так:

$$H \sum_{\vec{n}, v} e^{i\vec{k}\vec{n}} C_v^\mu \phi_v(\vec{r} - \vec{n}) = E \sum_{\vec{n}, v} e^{i\vec{k}\vec{n}} C_v^\mu \phi_v(\vec{r} - \vec{n}). \quad (6)$$

Після елементарних перетворень, отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\sum_v C_v^\mu \left[(E_v^0 - E) \left(\delta_{vv'} + 2 \sum_{i=1}^3 A_{vv'}^i \cos(k_i a_i) \right) + 2 \sum_{i=1}^3 [B_{vv'}^i + P_{vv'}^i \cos(k_i a_i)] \right] = 0, \quad (7)$$

де

$$A_{vv'}^i = \int \phi_v^*(\vec{r} - \vec{a}_i) \phi_{v'}(\vec{r}) d\vec{r},$$

$$B_{vv'}^i = \int \phi_v^*(\vec{r}) V(\vec{r} - \vec{a}_i) \phi_{v'}(\vec{r}) d\vec{r},$$

$$P_{vv'}^i = \int \phi_v^*(\vec{r} - \vec{a}_i) V(\vec{r} - \vec{a}_i) \phi_{v'}(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (8)$$

Прирівнявши визначник складений з величин, що знаходяться біля невідомих коефіцієнтів C_v^μ у системі (7) до нуля, матимемо дисперсійне рівняння для визначення енер-

гетичного спектру НСКТ $E(\vec{k})$. Умова нормування $\sum_v (C_v^\mu)^2 = 1$ дозволила обчислити коефіцієнти розкладу $C_v^\mu(\vec{k})$, які в загальному випадку залежать від хвильового вектора.

2. ЗАКОНИ ДИСПЕРСІЇ ЕЛЕКТРОНІВ НСКТ

Конкретні обчислення проведено для кубічної надгратки сферичних квантових точок (НСКТ) GaAs/AlAs з наступними параметрами:

$$m_{1e} = 0.0665 m_0, \quad m_{2e} = 0.15 m_0, \quad U_0 = 0.968 \text{ eV}.$$

Перш, ніж перейти до аналізу обчислень, розглянемо зону Брілюєна для кубічної (3D-) та квадратної (2D-) надгратки.

На рис.2 наведено зони Брілюєна надграток з кубічною (рис.2а) та квадратною симетрією (рис.2б). Точки високої симетрії у випадку тривимірної надгратки є такимим:

$$\Gamma(0,0,0), \quad X(0,0,\frac{\pi}{a}), \quad M(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a},0), \quad R(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}),$$

а характерні напрямки $-\Delta\{\Gamma \rightarrow X\}$, $S\{X \rightarrow R\}$, $T\{R \rightarrow M\}$, $\Sigma\{M \rightarrow \Gamma\}$. У випадку

$$\text{двовимірної надгратки } -\Gamma(0,0), \quad M(\frac{\pi}{a},\frac{\pi}{a}),$$

$$X(\frac{\pi}{a},0).$$

Характерні напрямки прийнято позначати так: $\Sigma\{\Gamma \rightarrow M\}$, $Z\{M \rightarrow X\}$, $\Delta\{X \rightarrow \Gamma\}$.

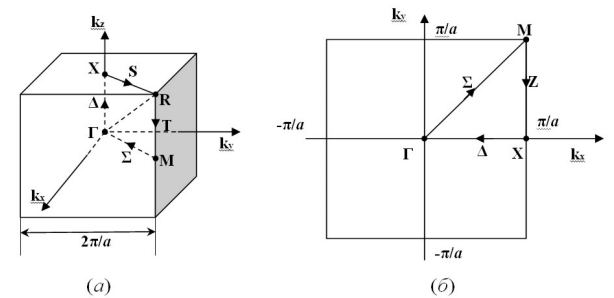


Рисунок 2. Зона Брілюєна тривимірної (а) та двовимірної (б) НСКТ.

На рис.3 зображено електронну зонну структуру кубічної НСКТ обчислену згідно з формулами (7)-(8) для $R=30 \text{ \AA}$ та $R=36 \text{ \AA}$. Обчислення показали, що в окремій КТ з $R=30 \text{ \AA}$ існують s- і три p-стани електрона, а коли $R=36 \text{ \AA}$, то у КТ виникають ще п'ять d-станів.

Розрахунок закону дисперсії надгратки з $R=30 \text{ \AA}$ проводився з використанням хвильової функції електрона надгратки у вигляді (4) та (5). Коли не враховувати взаємний вплив електронних станів (гібридизацію станів), то отримуємо закон дисперсії, що зображений штриховими лініями на рис.3а. Нижня s -підзона (крива 1') характеризується плавною залежністю енергій від хвильового вектора з максимумом в точці R зони Брілюєна.

Для p -підзон отримуємо два види залежностей енергії електрона від хвильового вектора: p_z -підзона (крива 2') та вироджена p_x / p_y -підзона (крива 3'/4'). Бачимо, що X та M є точками екстремуму законів дисперсії.

Перемішування станів спричиняє зменшення енергії всіх електронних підзон надгратки (суцільні криві) та зумовлює невелике розщеплення верхньої (в області Γ - R) та нижньої (в області R - Γ) p -підзон. Аналіз хвильових функцій показує, що в найнижчій зоні "підмішування" p -станів дуже мале і тому її можна вважати s -підзоною. Що стосується верхніх підзон, то, строго кажучи, їх не можна назвати p_z -, p_y - чи p_x -підзонами, бо за-

лежно від точки зони Брілюєна існує перемішування як p -станів, так і s -станів. Наприклад, в точці X зони Брілюєна

$$\psi_1 = 0.9925\psi_s - 0.0556\psi_{p_z} + 0.0767\psi_{p_x} + 0.0767\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0.2278\psi_s + 0.9735\psi_{p_z} - 0.0126\psi_{p_x} - 0.0126\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0.2660\psi_s - 0.0373\psi_{p_z} - 0.6811\psi_{p_x} - 0.6811\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 0.7071\psi_{p_x} - 0.7071\psi_{p_y}$$

а для точки M маємо

$$\psi_1 = 0.9938\psi_s + 0.0774\psi_{p_z} - 0.0561\psi_{p_x} - 0.0561\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0.3443\psi_s - 0.0198\psi_{p_z} + 0.6637\psi_{p_x} + 0.6637\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} - 0.7071\psi_{p_x} + 0.7071\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = 0.1995\psi_s - 0.9791\psi_{p_z} - 0.0285\psi_{p_x} - 0.0285\psi_{p_y}$$

Збільшення радіуса квантових точок надгратки зумовлює збільшення кількості підбар'єрних підзон. На рис.3б подано закон дисперсії електронів НГ для $R=36 \text{ \AA}$. В цьому випадку крім s - та p -підзон підбар'єрними стають і d -підзони. Змінюється енергетична відстань між підзонними екстремальними значеннями енергії. Маємо також перемішування між станами. Зокрема, для точки M зони Брілюєна отримуємо:

$$\psi_1 = 0.9723\psi_s + 0.0540\psi_{p_1} + 0.0172\psi_{p_2} + 0.0172\psi_{p_3} - 0.2260\psi_{d_1} - 0.0018\psi_{d_2} - 0.0018\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} - 0.0014\psi_{d_5}$$

$$\psi_2 = 0\psi_s + 0\psi_{p_1} + 0.6893\psi_{p_2} - 0.6893\psi_{p_3} - 0\psi_{d_1} - 0.0331\psi_{d_2} + 0.0331\psi_{d_3} + 0.2180\psi_{d_4} + 0\psi_{d_5}$$

$$\psi_3 = 0.3310\psi_s + 0.1750\psi_{p_1} + 0.6394\psi_{p_2} + 0.6394\psi_{p_3} - 0.1963\psi_{d_1} + 0.0226\psi_{d_2} + 0.0226\psi_{d_3} - 0\psi_{d_4} - 0.0499\psi_{d_5}$$

$$\psi_4 = 0.0584\psi_s - 0.9905\psi_{p_1} + 0.0454\psi_{p_2} + 0.0454\psi_{p_3} + 0.0851\psi_{d_1} + 0.0449\psi_{d_2} + 0.0449\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} - 0.0034\psi_{d_5}$$

$$\psi_5 = 0.4047\psi_s + 0.4839\psi_{p_1} - 0.1997\psi_{p_2} - 0.1997\psi_{p_3} - 0.7226\psi_{d_1} - 0.0053\psi_{d_2} - 0.0053\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} - 0.0115\psi_{d_5}$$

$$\psi_6 = 0.0528\psi_s - 0.0399\psi_{p_1} + 0.0926\psi_{p_2} + 0.0926\psi_{p_3} - 0.0636\psi_{d_1} - 0.0037\psi_{d_2} - 0.0037\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} + 0.9871\psi_{d_5}$$

$$\psi_7 = -0.0122\psi_s - 0.1775\psi_{p_1} + 0.0889\psi_{p_2} + 0.0889\psi_{p_3} + 0.0792\psi_{d_1} - 0.6878\psi_{d_2} - 0.6878\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} - 0.0130\psi_{d_5}$$

$$\psi_8 = 0\psi_s + 0\psi_{p_1} - 0.0889\psi_{p_2} + 0.0889\psi_{p_3} + 0\psi_{d_1} - 0.7009\psi_{d_2} + 0.7009\psi_{d_3} + 0.0407\psi_{d_4} + 0\psi_{d_5}$$

$$\psi_9 = 0\psi_s - 0\psi_{p_1} - 0.2935\psi_{p_2} + 0.2935\psi_{p_3} - 0\psi_{d_1} + 0.2935\psi_{d_2} - 0.2935\psi_{d_3} + 0.908826\psi_{d_4} - 0\psi_{d_5}$$

Γ :

$$\psi_1 = 0.9992\psi_s + 0.0227\psi_{p_1} + 0.0227\psi_{p_2} + 0.0227\psi_{p_3} + 0\psi_{d_1} + 0.0028\psi_{d_2} + 0.0028\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} + 0.0028\psi_{d_5}$$

$$\psi_2 = 0\psi_s - 0.4779\psi_{p_1} + 0.8044\psi_{p_2} - 0.3265\psi_{p_3} + 0.0733\psi_{d_1} + 0.0411\psi_{d_2} + 0.0167\psi_{d_3} - 0.1001\psi_{d_4} + 0.0244\psi_{d_5}$$

$$\psi_3 = 0\psi_s - 0.1280\psi_{p_1} - 0.6279\psi_{p_2} + 0.7559\psi_{p_3} + 0.0196\psi_{d_1} + 0.0321\psi_{d_2} - 0.0387\psi_{d_3} + 0.1225\psi_{d_4} + 0.0065\psi_{d_5}$$

$$\psi_4 = -0.1763\psi_s + 0.5654\psi_{p_1} + 0.5654\psi_{p_2} + 0.5654\psi_{p_3} + 0\psi_{d_1} + 0.0572\psi_{d_2} + 0.0572\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} + 0.0572\psi_{d_5}$$

$$\psi_5 = 0\psi_s - 0.0732\psi_{p_1} - 0.4294\psi_{p_2} + 0.5026\psi_{p_3} - 0.1007\psi_{d_1} + 0.0076\psi_{d_2} - 0.0089\psi_{d_3} - 0.7398\psi_{d_4} + 0.0013\psi_{d_5}$$

$$\psi_6 = 0\psi_s + 0.4250\psi_{p_1} - 0.5053\psi_{p_2} + 0.0804\psi_{p_3} + 0.5843\psi_{d_1} + 0.0090\psi_{d_2} - 0.0014\psi_{d_3} - 0.4649\psi_{d_4} - 0.0075\psi_{d_5}$$

$$\psi_7 = 0.0320\psi_s - 0.1487\psi_{p_1} - 0.1487\psi_{p_2} - 0.1487\psi_{p_3} + 0\psi_{d_1} + 0.5574\psi_{d_2} + 0.5574\psi_{d_3} + 0\psi_{d_4} + 0.5574\psi_{d_5}$$

$$\psi_8 = 0\psi_s + 0.0365\psi_{p_1} - 0.0939\psi_{p_2} + 0.0574\psi_{p_3} - 0.0113\psi_{d_1} - 0.8041\psi_{d_2} + 0.4913\psi_{d_3} + 0.0270\psi_{d_4} + 0.3126\psi_{d_5}$$

$$\psi_9 = 0\psi_s + 0.0860\psi_{p_1} - 0.0087\psi_{p_2} - 0.0773\psi_{p_3} - 0.0266\psi_{d_1} - 0.0744\psi_{d_2} - 0.6619\psi_{d_3} - 0.0122\psi_{d_4} + 0.7362\psi_{d_5}$$

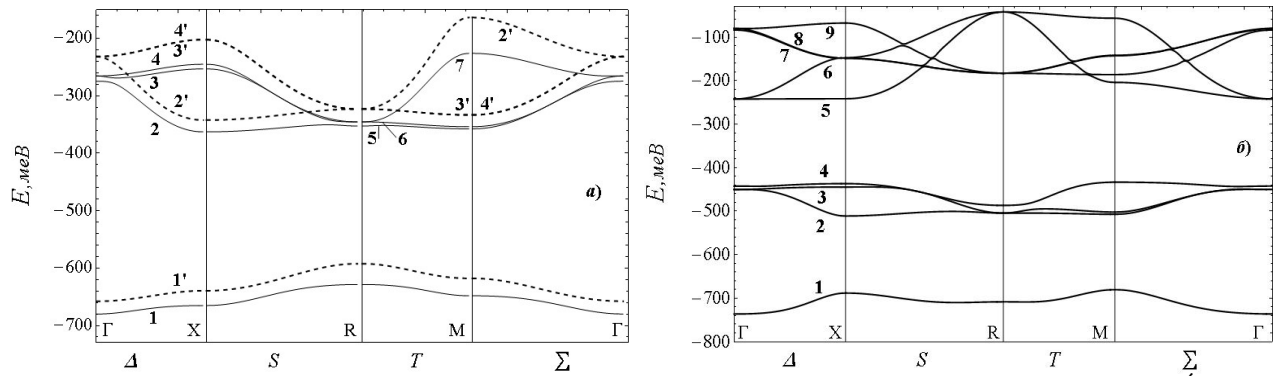


Рисунок 3. Енергетичні підзони електронів в зоні Брілюєна в тривимірній надгратці для $R=30$ Å (а) та $R=36$ Å (б).

Закони дисперсії електронів одновимірної та двовимірної НСКТ подано на рис.4. Видно, що у випадку одновимірної надгратки (рис.4а) максимум та мінімум для p -рідзон знаходиться на краях зони Брілюєна, а їх перетин знаходиться посередині зони Брілюєна. Видно, що як для хвильової функції виду (4), так і хвильової функції виду (5) характерне виродження зонних станів. Зокрема, лінія 2',3' відповідає x , y -підзонам, а лінія 4' – z -підзоні. У випадку гібридизації станів підзони є «скланішими». Зокрема, для

$$k_z = 0.005 \frac{\pi}{a} \text{ маємо}$$

$$\psi_1 = 0.9981\psi_s + 0.0612\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} - 1\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} - 1\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = 0.1747\psi_s - 0.9846\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}.$$

$$\text{Коли ж } k_z = 0.02 \frac{\pi}{a}, \text{ то}$$

$$\psi_1 = 0.9994\psi_s - 0.0357\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0.1689\psi_s - 0.9856\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 1\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 1\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}.$$

У двовимірній НСКТ (рис.4б) ситуація є проміжною між одно- і тривимірним випадками. Для p -підзон величини абсолютних максимумів і мінімумів знаходяться в точках високої симетрії Γ , M , X . Що стосується підзон, то їх енергії для хвильової функції виду (4) є більшими, ніж у випадку перемішування станів, а підзони можна назвати так: крива 2' – p_z -підзона, крива 3' – p_x -підзона, 4' – p_y -підзона. У напрямку Σ зони Брілюєна маємо виродження підзон p_x / p_y .

Уточнення моделі (формула 5) спричиняє підзонне розщеплення і супроводжується гібридизацією станів. Зокрема, в точці Γ

$$\psi_1 = 0.9962\psi_s + 0.0614\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0.0614\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 1\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0.2364\psi_s - 0.6870\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0.6871\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = \psi_s + 0.7071\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} - 0.7071\psi_{p_y},$$

а в точці X зони Брілюєна –

$$\psi_1 = 0.9971\psi_s - 0.0457\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} + 0.06147\psi_{p_y}$$

$$\psi_2 = 0.2093\psi_s + 0.9777\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} - 0.0143\psi_{p_y}$$

$$\psi_3 = 0\psi_s + 0\psi_{p_z} + 1\psi_{p_x} + 0\psi_{p_y}$$

$$\psi_4 = 0.1768\psi_s - 0.0249\psi_{p_z} + 0\psi_{p_x} - 0.9839\psi_{p_y}.$$

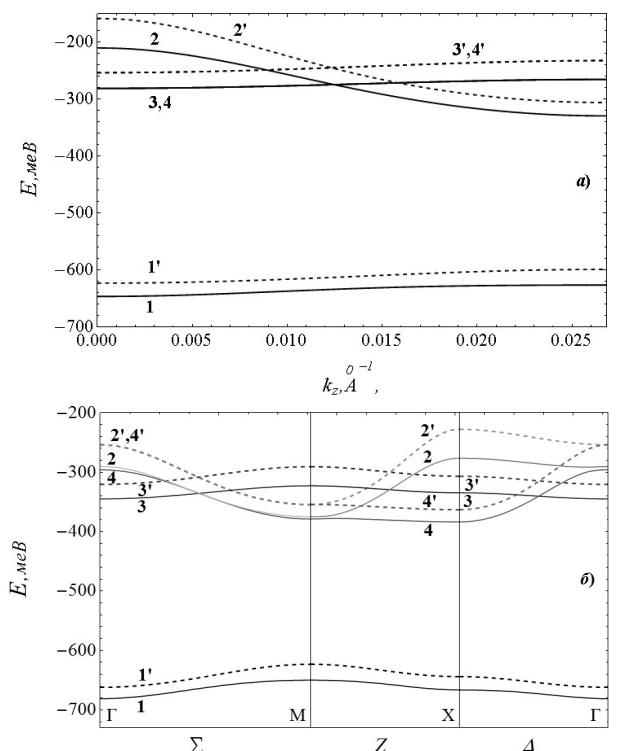


Рисунок 4. Енергетичні підзони електронів в одновимірній (а) та в двовимірній НСКТ (б) для $R=30$ Å.

Досі ми аналізували енергетичний спектр електрона НСКТ. Проаналізуємо як впливає розмір системи на ширину електронних підзон. З рис.5 видно, що для s-підзон незалежно від вимірності надгратки $\Delta E = \Delta E(R)$ є монотонно спадною функцією від R . Однак величина ширини підзони при заданому R для 3D-надгратки є найбільшою, а для 1D – найменшою. Обчислення показали також, що зі зменшенням періоду надгратки збільшується ширина енергетичних зон і відбувається їх зсув у високоенергетичну область. Отримані результати можна пояснити збільшенням перекриття хвильових функцій електронів, що знаходяться у сусідніх КТ. Аналогічні залежності отримуємо і для p-, d-подібних підзон електрона у НСКТ.

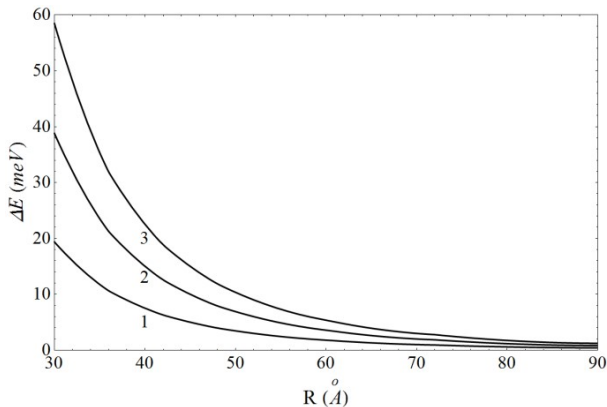


Рисунок 5. Залежність ширини s-подібної підзони електрона у системі НСКТ GaAs/AlAs. Крива 1 – для 1D-НСКТ, 2 – 2D-НСКТ, 3 – 3D-НСКТ.

На основі відомих хвильових функцій станів можна обчислити сили осциляторів міжпідзонних квантових переходів електрона. Сила осцилятора квантового переходу електрона зі стану v в стан v' визначає ймовірність такого переходу і є зручною характеристикою таких переходів та визначається формулою [41]:

$$f_{vv'}^z = \frac{1}{i\hbar} \sum_v \{ \langle v | z | v' \rangle \langle v' | p_z | v \rangle - \langle v | p_z | v' \rangle \langle v' | z | v \rangle \} \quad (9)$$

На рис.6 зображена залежність сили осцилятора f міжпідзонних переходів електронів в зоні Брілюена в одновимірній (рис.6а), двовимірній (рис.6б) та тривимірній надгратках (рис.6в) для різних радіусів КТ $R=25$ Å і $R=30$ Å. При розрахунку враховано можливість перемішування станів електрона. Як видно з рис.6, сили осцилятора переходу приймають мінімальні значення (як локаль-

ний, так і глобальний мінімуми) в точках високої симетрії Γ , M , X (двовимірна гратка), Γ , X , R , M (тривимірна гратка) та максимальні значення в середині області в напрямках Σ , Z , Δ (двовимірна гратка), Δ , T , Σ (тривимірна гратка). У випадку 1D-гратки ситуація аналогічна: мінімальне значення сили осцилятора отримуємо на краях зони Брілюена, а максимальне всередині неї. Як і у випадку залежностей енергетичних зон електрона, характерною особливістю для всіх структур (одно-, дво- і тривимірних НСКТ) є значне зменшення величини сили осцилятора, особливо біля точок високої симетрії.

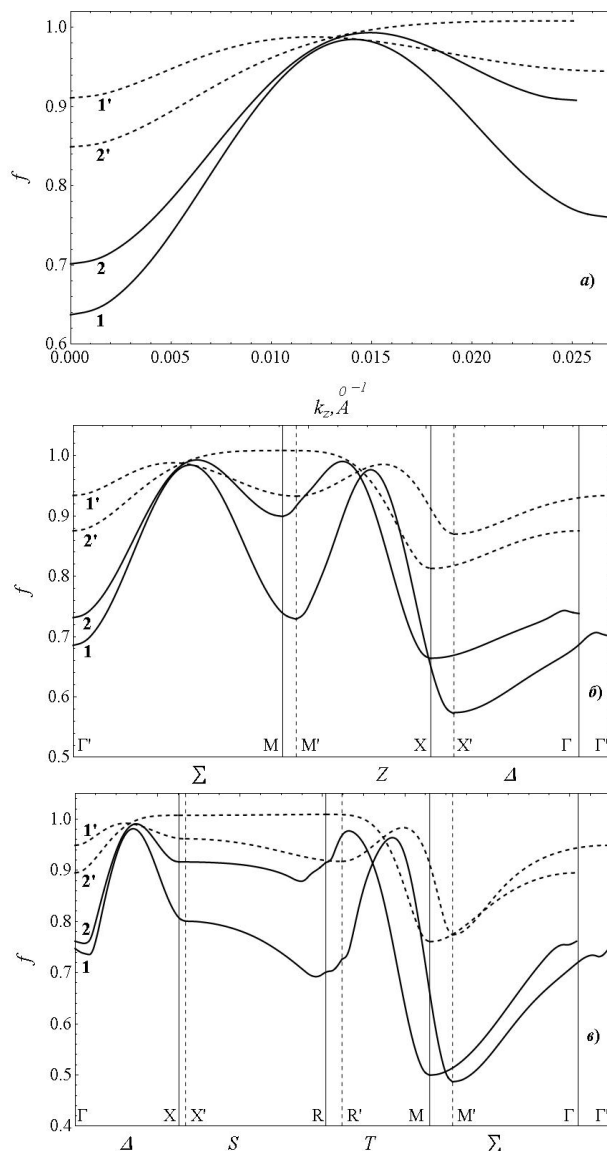


Рисунок 6. Сили осцилятора міжпідзонних переходів електрона в зоні Брілюена в одновимірній (а), двовимірній (б) та тривимірній (в) надгратці для $R=25$ Å (крива 1) і $R=30$ Å (крива 2).

ВИСНОВКИ

В роботі запропоновано теорію надграток різної вимірності (3D-, 2D-, 1D-) з квантових точок кристалу типу GaAs у матриці AlAs. Розглянуто випадок малих розмірів КТ (2,5-3,5 нм), коли в кожній точці 2-3 зв'язані (підбар'єрні) стани. Зроблено припущення про те, що квантові точки є сферично симетричними з малою дисперсією за розмірами.

Для обчислення залежності енергії підбар'єрних підзон електрона надграток від хвильового вектора використано наближення сильного зв'язку. Таке наближення обґрунтовано тим, що коли відстань між сусідніми КТ більша (чи рівна) за сталу надгратки перекриття хвильових функцій зазначених станів є досить малим, а переміщення заряду між КТ відбувається у вигляді тунелювання через міжямні бар'єри.

При використанні методу сильного зв'язку використано базиси хвильових функцій, що задають незвідні представлення точкової групи симетрії O_h і розглянуто два підходи при обчисленні закону дисперсії електрона НСКТ, коли гібридизацію станів враховано або нею нехтується. Встановлено, що гібридизація електронних станів в НСКТ призводить до невеликого розщеплення енергії для певних значень хвильового вектора, а також до зменшення енергії всіх підзон, яке також залежить від $\vec{k}$ та номера підзони.

Обчислення енергії $E = E(\vec{k})$ для надграток різних вимірностей показує, що закони дисперсії 3D-, 2D- та 1D-надграток, значення енергії в особливих точках зони Брілюена, значно відрізняються між собою навіть для однакових розмірів КТ та відстаней між ними. Зміна радіуса квантових точок R та відстані між ними в надгратках також змінюють закони дисперсії та ширини підзон НСКТ. Сила осцилятора квантового переходу електрона з основної s -підзони у підзони p -типу для лінійно поляризованого світла для всіх точок зони Брілюена приймає досить велике значення: $0.48 \leq f \leq 1.0$. Нехтування гібридизацією електронних станів у НСКТ в окремих точках призводить до росту функції $f = f(\vec{k})$, так в цілому вона стає плавнішою, а $0.75 \leq f \leq 1.0$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Gaponenko S. Optical properties of semiconductor nanocrystals. Cambridge, 1998.
- [2] Hand book of Semiconductor Nanostructures and Nano-devices. V. 1. Quantum dots, Nanovires and Self-Assemblies // Ed. Balandin A.A., Wang K. N.Y.: Amer. Sci. Publ., 2006
- [3] Woggon U. Optical properties of semiconductor quantum dots. Berlin, 1997. 251 p.
- [4] Reiss P., Protiere N., Li. L. // Small. 2009. V. 5. No 2. P. 154.
- [5] Bera D., Qian L., Tseng T.— K., et al. // Materials. 2010. V. 3. P. 2260.
- [6] Hewa-Kasakarage N. N., El-Khoury P. Z., Tarnovsky A. N., et al. // ACS Nano. 2010. V. 4. No 4. P.1837.
- [7] Deka S., Quarta A., Lupo G. M., et al. // J.Am. Chem. Soc. 2009. V. 131. No 8. P. 2948.
- [8] Anikeeva P. O., Halpter J. E., Bawendi M. G., et al. // Nano Lett. 2009. V. 9. No 7. P. 2532
- [9] Klimov V. I., Mikhailovsky A. A., Xu S., et al. // Science. 2000. V. 290. P. 314
- [10] Oertel D. C., Bawendi M. G., Arango A. C., et al. // Appl. Phys. Lett. 2005. V. 87. No 21. P. 213505.
- [11] Эфрос Ал. Л., Эфрос А. Л. // ФТП. 1982. Т. 16. Вып. 7. С. 1209.
- [12] Екимов А. И., Онущенко А. А., Плюхин А. Г. и др. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. Вып. 4. С. 1490.
- [13] Григорян Г. Б., Казарян Э. М., Эфрос Ал. Л. и др. // ФТТ. 1990. Т. 32. Вып. 6. С. 1772
- [14] Schulz S., Mourad D., Schumacher S., et al. // Phys. Status Sol. B. 2011. V. 248. No8. P. 1853.
- [15] Schrier J., Wang L.— W. // Phys. Rev. B. 2006. V.73. No24.P. 245332.
- [16] Mavros M. G., Micha D. A., Kilin D. S. //J. Phys. Chem. C. 2011. V. 115. No 40. P. 19529.
- [17] Scully M. O., Zubairy M. S. Quantum optics. Cambridge, 1997.630 p.
- [18] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, Nanotechnology 11, 256 (2000).
- [19] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, Appl. Phys. Lett. 87, 213106-1 (2005).
- [20] D.P. Williams, A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, Phys. Rev. B. 73, 241301-1 (2006).
- [21] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, Thin Solid Films 364, 291 (2000).

- [22] A.D. Andreev, E.P. O'Reilly, Excitonic Processes in Condensed Matter (Electrochemical Proc. Ser. PV 98-25), 272 (1998).
- [23] M.V. Tkach, I.V. Pronyshyn, A.M. Makhanets, V.M. Golovach, G.G. Zegrya, Condensed Matter Physics 2, 553 (1999).
- [24] Н.В. Ткач, А.М. Маханец, Г.Г. Зегря, ФТП 36, 543 (2002).
- [25] N.V. Tkach, A.M. Makhanets, G.G. Zegrya, Semicond. Sci. Technol. 15, 395 (2000).
- [26] М.В. Ткач, О.М. Маханець, Г.Г. Зегря, Науковий вісник Чернівецького університету 132, 59 (2002).
- [27] М.В. Ткач, О.М. Маханець, Г.Г. Зегря, Укр. фіз. журн. 48, 155 (2003).
- [28] V.A. Holovatsky, V.I. Gutsul, O.M. Makhanets, Rom. Journ. Phys. 52, 327 (2007).
- [29] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, O.A. Sokolnyk, I.O. Shakleina, Condensed Matter Physics 16, 33702: 1 (2013).
- [30] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskiy, R.I. Pazyuk, Proceedings of the VIII International School-Conference ["Actual problems of semiconductor physics"], (Drohobych, June 25-28, 2013), p.7 (2013).
- [31] В. А. Головацький Науковий вісник Чернівецького університету. 2000. Випуск 92, Фізика. Електроніка. с 9-10
- [32] Klimov V.I. et al. Electron and hole relaxation pathways in semiconductor quantum dots // Phys. Rev. B. 1999. V. 60. P.13740-13749.
- [33] Sewall S.L, Cooney R.R., Anderson K.E.H. et al. State-to-state exciton dynamics in semiconductor quantum dots // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P.235328-(1-8).
- [34] Cooney R.R., Sewall S.L. et al. Unified picture of electron and hole relaxation pathways in semiconductor quantum dots // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P.245311-(1-14).
- [35] Okuno T. et al. Strong confinement of PbSe and PbS quantum dots // J. Lumin. 2000. V. 87-89. P. 491-493.
- [36] Harbold J.M. et al. Time-resolved intraband relaxation of strongly confined electrons and holes in colloidal PbSe nanocrystals // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P.195312-(1-6).
- [37] Chu, I.-H., Radulaski, M., Vukmirovic, N., Cheng, H.-P. & Wang, L.-W. Charge transport in a quantum dot supercrystal. J. Phys. Chem. C115, 21409–21415(2011).
- [38] Lazarenkova, O. L., Balandin, A. A. Electron and phonon energy spectra in a three-dimensional regimented quantum dot superlattice. Phys. Rev. B66, 245319 (2002).
- [39] Artemyev, M. V. et al. Optical properties of dense and diluted ensembles of semiconductor quantum dots. Phys. Status Solidi (b) 224, 393–396 (2001).
- [40] Joe, Y. S., Ikeler, D. S., Cosby, R. M., Sattain, A. M. & Kim, C. S. Characteristics of transmission resonance in a quantum-dot superlattice. J. Appl. Phys. 88, 2704–2708 (2000)
- [41] А.С.Давыдов Квантовая механика (Наука, Москва, 1972).