ՀԱՅԱՍՏԱՆԻ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱ
НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК АРМЕНИИ
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF ARMENIA
ДОКЛАДЫ ԶԵԿՈՒՅՑՆԵՐ REPORTS

Հատոր Том Volume 107 2007 № 2

ФИЗИКА

УДК 621.315

Ал. Г. Алексанян

О сдвиге энергии оптического перехода в ансамбле квантовых точек

(Представлено академиком Э. М. Казаряном 3/IV 2007)

Ключевые слова: *квантовая точка, параметр дисперсии, усредненный ограничивающий потенциал*

1. Ансамбли квантовых точек (КТ) являются наиболее интересным объектом для использования в качестве среды приборов оптоэлектроники следующего поколения. Для улучшения их характеристик необходимо обеспечить уменьшение дисперсии КТ по размерам, что приводит к сужению контура фотолюминесценции. Несмотря на совершенство существующих технологий [1], в реальных структурах преобладает неоднородное уширение контура излучения, вследствие вариации их размеров. Поскольку в массиве КТ могут иметь различные размеры, сдвиги по частоте, испытываемые каждой КТ, будут различны, а форма контура излучения ансамбля КТ в целом будет определяться функцией распределения излучающих КТ по размерам.

Из экспериментально наблюдаемых спектров излучения можно обратить внимание [2] на тот факт, что для подгонки формы спектров спонтанного излучения применим форм-фактор в виде $g(\hbar\omega) = ch^{-2}(\frac{E-E_0}{\gamma})$ (E - энергия, E_0 - центр линии, γ - параметр ее ширины). Можно положить (во всяком случае для малой дисперсии по размерам), что функция, описывающая отклонение размеров КТ от их среднего размера R_0, будет иметь аналогичную форму, т.е

$$\rho(R) = \frac{const}{ch^2(\frac{R-R_0}{a})}, \tag{1}$$

a характеризует дисперсию КТ по размерам.

В настоящей работе проводится оценка сдвига энергии оптического перехода в массиве КТ, в зависимости от дисперсии КТ по размерам и среднего радиуса КТ.

Будем рассматривать ансамбль КТ, имеющих конечную высоту ограничивающего потенцала U_0. При этом предполагается, что радиусы КТ распределены по закону (1). Уравнение Шредингера в приближении эффективной массы для электрона (дырки) в отдельной КТ

$$-\frac{\hbar}{2m^*}\nabla^2\Psi_{C,V}(\vec{r}) + V_{C,V}(\vec{r})\Psi_{C,V}(\vec{r}) = E_{C,V}\Psi_{C,V}(\vec{r}). \tag{2}$$

Если принять, что ограничивающий потенциал $V(\vec{r})$ для различных КТ представляет собой прямоугольные потенциальные ямы, то усреднение $V(\vec{r})$ по распределению (1), т.е.

$$< V(r) >= U(r) = \int_0^1 U_0\rho(R)dR,$$

даст нам вид усредненного ограничиваюшего потенциала

$$U(\vec{r}) = \frac{U_0}{1 + th(R_0/a)}\Big[th\Big(\frac{r - R_0}{a}\Big) + th\Big(\frac{R_0}{a}\Big)\Big]. \tag{3}$$

Потенциал (3) в отличие от прямоугольного потенциала отдельной КТ плавно изменяется в интервале a, внутри которого падает от $U(\infty) = U_0$ до значения $U(0) = 0$.

В работе [3] с помощью потенциала Вуда-Саксона [4] построен подобный потенциал. Там же приведены решения уравнения Шредингера с таким потенциалом и определены уровни энергии.

Оценим влияние подобного "закругления" краев ямы на наблюдаемую энергию оптического перехода. Изменение положения энергетических уровней при переходе от прямоугольного к среднестатистическому потенциалу (3) можно определить, пользуясь теорией возмущений, если радиус КТ в массиве отклоняется от среднего значения на R_0 величину $a \prec\prec R_0$. В качестве нулевого приближения выбираем положение уровня и волновую функцию электрона (дырки) в прямоугольной яме с радиусом R_0. Как и в [5], для модельной волновой функции имеем

$$\Psi_0(\vec{r}) = A\Big(\frac{v_T a^*}{r}\Big)\exp\Big(-\frac{r}{v_T a^*}\Big). \tag{4}$$

Здесь A определяется из условия нормировки на единицу, так что

$$A = \Big\{4\pi\Big(v_O\frac{a^*}{2}\Big)^3\Big\}^{-1/2}, \quad a^* = \frac{m\varepsilon}{m^*\varepsilon_0}a'_B, \quad v_T a^* \quad -$$

соответственно эффективный и модифицированный боровские радиусы, а

$$v_T = \Big(\frac{R^*}{U_0 - E_0}\Big)^{-1/2}, \quad R^* = \frac{(e^2/4\pi\varepsilon)^2}{2(\hbar^2/m^*)} \quad -$$

эффективная энергия Ридберга (ε - диэлектрическая проницаемость материала матрицы), $(U_0 - E_0)$ - наблюдаемая невозмущенная энергия связи.

Вообще говоря, в области $r < R_0$ огибающая функция для основного состояния имеет вид

$$\Psi_0(r) = A_1 j_0(\alpha r),$$

где A_1 - постоянная, $j_0(\alpha r)$ - сферическая функция Бесселя, $\alpha^2 = 2m^* E_0/\hbar^2$. В области $r > R_0$ огибающая функция представляется как

$$\Psi_0(r) = A_2 W_{0,1/2}(\frac{2r}{v_T a^*}),$$

где $W_{0,1/2}(\frac{2r}{v_T a^*})$ - функция Уиттекера [6].

Обычно [7] для того, чтобы описать всю волновую функцию, даже в области $r < R_0$, достаточно взять асимптотику функции Уиттекера, что и приводит к (4).

Для энергии основного состояния усредненного ограничиваюшего потенциала КТ имеем

$$E = E_0 + \int \Psi_0^* |U(\vec{r}) - V(\vec{r})| \psi_o dv. \tag{5}$$

Очевидно, что матричный элемент потенциала возмущения $|U(\vec{r}) - V(\vec{r})|$ отличен от нуля в интервале $r \sim a$ вблизи R_0 и не превосходит величину

$$\Delta E = U_0 \int\limits_{R_0-a}^{R_0+a} \psi_0^2(r) r^2 dr. \tag{6}$$

Подставляя (4) в (6) , после элементарного интегрирования получаем

$$E = E_0 + \frac{U_0}{4\pi^2} \exp(-\frac{2R_0}{v_T a^*}) \exp(\frac{2a}{v_T a^*}). \tag{7}$$

Из (7) видно, что с увеличением параметра a уровень энергии имеет тенденцию выталкивания из ямы. С увеличением среднего радиуса R_0 ограничивающего потенциала КТ влияние дисперсии по размерам на положение уровня энергии уменьшается.

Отметим, что наиболее чувствительными к подобным сдвигам энергии могут быть структуры на основе III-нитридов. В отличие от систем на основе арсенидов они имеют малую величину разрыва в зоне проводимости, и наиболее существенное отличие состоит в заметно меньших размерах КТ.

Арцахский государственный университет

Ալ. Գ. Ալեքսանյան

Քվանտային կետերի անսամբլում օպտիկական անցումների էներգիայի շեղման մասին

Քվանտային կետերի ըստ շառավիղների $sech^2x$ բաշխման տեսքի ենթադրությամբ որոշված է սահմանափակող պոտենցիալի միջինացված տեսքը: Գնահատված է էներգիական մակարդակի շեղումը՝ պայմանավորված քվանտային կետերի չափսերի դիսպերսիայով:

Al. G. Alexanian

On Shift of Energy of Optical Transitions in the Ansamble of Quantum Dots

The form of the average confining potential is determined under the assumption that the size distribution of quantum dots into the array is given by the $sech^2x$. The estimation of the energy shift as the function of quantum dots size dispersion is given.

Литература

1. *Черкашин Н. А. и др.* — ФТП. 2003. V. 37. P. 890.
2. *Евтихиев В. П. и др.* — ФТП. 1998. V. 32. P. 1482.
3. *Петросян Л. С.* — Изв. НАН Армении. Физика. 2002. V. 37. P. 173.
4. *Флюгге. З.* Задачи по квантовой механике. Т. 1. М. Мир. 1974.
5. *Ридли. Б.* Квантовые процессы в полупроводниках. М. Мир. 1986.
6. *Уиттекер Э. Т., Ватсон Дж. Н.* Курс современного анализа. М. Физматгиз. 1963.
7. *Bebb H.* — Phys. Rev. 1969. V. 185. P. 1116.