

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР С КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

Алькина В.В., Головкина М.В.

ФГБОУ ВО Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики,

Самара, e-mail: nauka77@yandex.ru

Рассматриваются различные типы излучающих гетероструктур, которые используются для создания полупроводниковых лазеров. Основной задачей создания полупроводниковых гетероструктур является изменение ширины запрещенной зоны активного слоя с целью создания источников излучения для различных спектральных диапазонов. Наличие небольшого количества гетеропар для изготовления гетероструктур приводит к необходимости изменения ширины запрещенной зоны путем введения квантовых ям или квантовых точек. В данной работе на основе модели спектра люминесценции и с учетом квантовомеханических эффектов исследованы спектральные характеристики гетероструктур с квантовыми точками. Расчеты волновых функций проводились в рамках метода Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна. Рассмотрены эпитаксиальные квантовые точки пирамидальной формы, полученные методом самоорганизации. Проведен расчет энергетических уровней электронов в приближении сферической квантовой точки. Показано, что энергия электрона внутри квантовой точки зависит от радиуса квантовой точки. Показано, что с уменьшением радиуса квантовой точки увеличивается расстояние между энергетическими уровнями. Рассмотрены параметры квантовых точек, находящихся в матрице GaAs. Проведены расчеты спектров люминесценции квантовых точек, на основе InAs. Показано, что изменение размеров квантовых точек приводит к существенному изменению длины волны люминесценции. Полученные результаты могут использоваться для создания полупроводниковых гетероструктур, которые содержат слои с твердотельными квантовыми точками, параметрами которых можно управлять путем изменения размера квантовых точек.

Ключевые слова: гетероструктура, полупроводник, квантовая точка, волновая функция, спектр излучения

CALCULATION OF LUMINESCENCE SPECTRA OF RADIATION STRUCTURES WITH QUANTUM DOTS

Alkina V.V., Golovkina M.V.

Povolzhskiy State University of Telecommunications & Informatics, Samara, e-mail:

nauka77@yandex.ru

Various types of radiating heterostructures that are used to create semiconductor lasers are considered. The main task of creating semiconductor heterostructures is to change the width of the forbidden band of the active layer in order to create radiation sources for different spectral ranges. The presence of a small number of heteropairs for the fabrication of heterostructures leads to the need to change the width of the forbidden band by introducing quantum wells or quantum dots. In this paper, the spectral characteristics of heterostructures with quantum dots are investigated on the basis of a model of the luminescence spectrum and taking into account quantum-mechanical effects. Calculations of the wave functions were performed within the framework of the Ventcel-Kramers-Brillouin method. Epitaxial quantum points of the pyramidal shape, obtained by the method of self-organization, are considered. The energy levels of electrons in the spherical quantum dot approximation are calculated. It is shown that the energy of an electron inside a quantum dot depends on the radius of the quantum dot. It is shown that as the radius of a quantum dot decreases, the distance between energy levels increases. The parameters of InAs quantum dots located in the GaAs matrix are considered. Calculations of the luminescence spectra of quantum dots based on InAs are carried out. It is shown that a change in the size of quantum dots leads to such changes in luminescence waves. The results obtained can be used to create semiconductor heterostructures that can be restrained by quantum dots whose parameters can be controlled by changing the size of points.

Keywords: heterostructure, semiconductor, quantum dot, wave function, radiation spectrum

Изучение квантовых структур, не только открывает новые страницы электронной инженерии, но и сопровождается открытиями фундаментального характера.

Физики уже накопили большой опыт в разработке приборов, действующих на квантовомеханических принципах. Если укладывать атомы с точностью до одного-двух слоев, можно создавать искусственные слоистые структуры на основе различных материалов, искусственные кристаллы, молекулы и атомы с заданными свойствами [1], [2], [6]. В данной работе рассматриваются полупроводниковые структуры, имеющие размеры порядка нескольких нанометров. Можно выделить несколько основных типов наноразмерных структур: квантовые ямы, квантовые нити и квантовые точки.

Впервые квантовые размерные эффекты в полупроводниковых структурах были продемонстрированы в 70-х годах на "квантовых ямах": структурах, состоящих из тонкой эпитаксиальной пленки полупроводникового материала с меньшей шириной запрещенной зоны, находящейся между двумя слоями полупроводника с большей шириной запрещенной зоны [3]. Квантово-размерные структуры можно классифицировать по числу измерений, движение носителей в которых ограничено и квантовано. Это двумерные структуры (квантовые ямы), одномерные структуры (квантовые проволоки), нульмерные структуры (квантовые точки, нанокластеры, нанокристаллиты).

Целью данной работы является исследование спектральных характеристик гетероструктуры с квантовыми точками на основе InAs, расчет энергетических уровней гетероструктур с квантовыми точками. В работе рассматривается влияние квантоворазмерных эффектов на спектральные характеристики гетероструктуры.

Квантовые точки – нульмерные нанообъекты, в которых движение носителей заряда квантовано во всех трех пространственных направлениях, и имеют дискретный энергетический спектр, соответствующий электронному спектру одиночного атома, хотя реальный квантовый объект при этом может состоять из тысяч атомов [4]. Поэтому квантовые точки называют «искусственными атомами». Квантовые точки являются важными нанообъектами с многочисленными практическими применениями. Многие их важные свойства, такие как поглощение и люминесценция определяются их размерами. Квантовые точки могут иметь форму пирамид, усеченных конусов, сфер и т. д., которая зависит от технологических условий их получения.

Квантовые точки бывают коллоидные – это отдельные микрообъекты, расположенные в каком-либо растворе и эпитаксиальные – это твердотельные квантовые точки, которые получают методом молекулярно-лучевой эпитаксии и используются в гетероструктурах для создания приборов оптоэлектроники.

Рассмотрим эпитаксиальные квантовые точки InAs в виде усеченного конуса. Такие квантовые точки можно аппроксимировать сферическими квантовыми точками, если подобрать специальным образом размер сферы. Как показано в работе [5], радиус сферы

можно подобрать следующим образом: он должен быть между сферой, которая вписана в этот конус и между сферой, описанной вокруг конуса. Достижения в области субмикронных технологий позволили создать квантовые точки, содержащие всего несколько электронов [7].

Рассмотрим энергетический спектр двух взаимодействующих электронов в жестком диске радиуса r_0 , в приближении эффективной массы, используя метод ВКБ (Квазиклассическое приближение Вентцеля – Крамерса – Бриллюэна). В рамках приближения ВКБ рассмотрим уравнение Шредингера для движения центра масс [7]:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu_R} \cdot \nabla_R^2 \cdot \Phi(R) = E_R \cdot \Phi(R), \quad (1)$$

где E_R – полная энергия центра масс электронов, которые могут находиться в квантовой точке, $\Phi(R)$ – волновая функция, описывающая движение центра масс, R – координата центра масс, μ_R – приведенная масса электронов.

Волновые функции электрона можно представить в виде [7]:

$$\Phi(R) = \frac{u_R(R)}{\sqrt{R}}, \quad (2)$$

где

$$u_R = R^{\frac{1}{2}} \cdot j_{\pm m_R} \left(\sqrt{\frac{2 \cdot \mu_R \cdot E_R}{\hbar}} \cdot R \right). \quad (3)$$

Здесь j – это функция Бесселя и m_R – это азимутальное квантовое число, которое принимает целые значения.

Энергетические уровни в квантовой точке сферической формы определяются следующей формулой [7]:

$$E_{nR} = \frac{\xi_n^2 \cdot \hbar^2}{8 \cdot \mu_R \cdot r_0^2}, \quad (4)$$

где r_0 – радиус квантовой точки, ξ_n – это нули функции Бесселя.

Результаты расчетов энергетических уровней в сферической квантовой точке приведены на рисунке 1. Из рисунка видно, что если радиус квантовой точки 2 нм, то расстояние между энергетическими уровнями очень маленькое, а при уменьшении радиуса квантовой точки до 1 нм расстояние между энергетическими уровнями увеличивается. Таким образом, рис. 1 иллюстрирует известную квантоворазмерную зависимость: чем меньше радиус квантовой точки, тем больше расстояние между энергетическими уровнями.

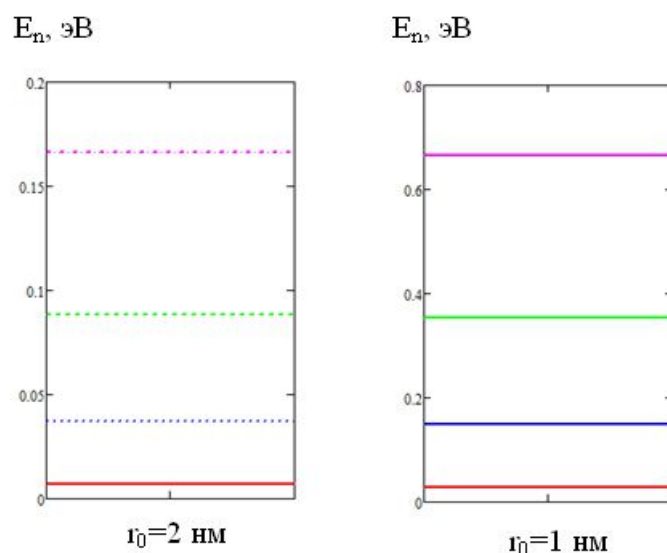


Рис. 1 – Энергетические уровни в квантовой точке сферической формы

На рис. 2 представлены результаты расчета первых трех волновых функций эпитаксиальной квантовой точки InAs.

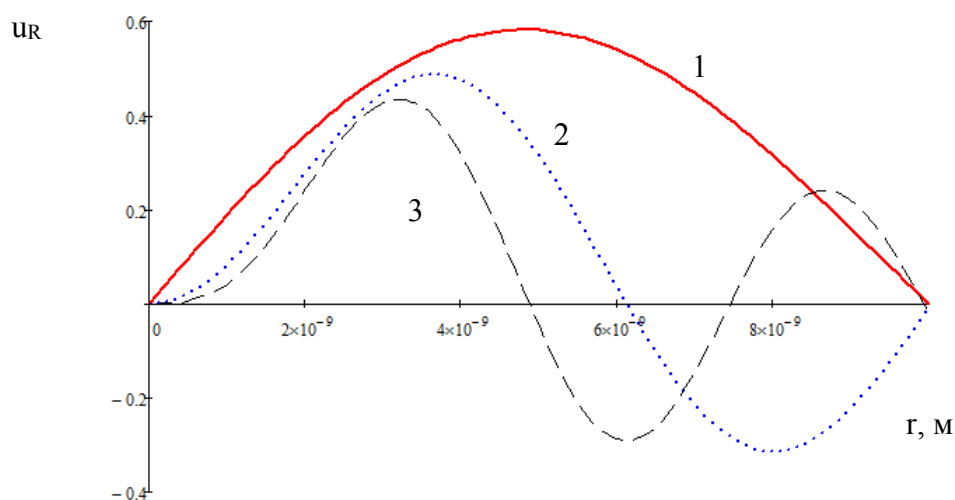


Рис. 2 – Волновые функции электрона в квантовой точке сферической формы. Расчет по формуле (3). Эффективный радиус сферы 10 нм

Проведем расчет спектральных характеристик квантовых точек. Для этого воспользуемся следующим методом. Энергия кванта света, который рождается в результате рекомбинации электронно-дырочной пары, то есть в результате перехода электрона с уровня с энергией E_2 на уровень с энергией E_1 , находится по известной формуле:

$$E_{\phi} = E_2 - E_1. \tag{5}$$

Следует отметить, что уровень E_2 находится вблизи дна в зоне проводимости, уровень E_1 находится вблизи потолка в валентной зоне. Вероятность рекомбинации электрона с энергией E_2 и дырки с энергией E_1 пропорциональна следующему произведению: $n(E_2)p(E_1)$, где $n(E_2)$ – концентрация электронов на уровне с энергией E_2 , $p(E_1)$ – концентрация дырок на уровне с энергией E_1 . Тогда спектральная плотность мощности излучения P для объемного полупроводника может быть найдена следующим образом:

$$P(E_\phi) \sim \int n(E_2)p(E_1)dE_2. \quad (6)$$

Результирующая спектральная плотность мощности излучения находится путем интегрирования по всем возможным значениям энергии E_2 , принадлежащим интервалу $E_c \div E_v + E_\phi$:

$$\begin{aligned} P(E_\phi) &= K \int_{E_c}^{E_v + E_\phi} \exp\left[-\frac{(E_c - E_v)}{kT}\right] \exp\left[-\frac{(E_2 - E_1)}{kT}\right] dE_2 = \\ &= K \exp\left(\frac{E_g}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_\phi}{kT}\right) \int_{E_c}^{E_v + E_\phi} dE_2 = K(E_\phi - E_g) \exp\left[-\frac{E_\phi - E_g}{kT}\right], \end{aligned} \quad (7)$$

где $E_g = E_c - E_v$ – ширина запрещенной зоны, E_ϕ – это энергия излученного фотона, k – постоянная Больцмана, E_c – дно зоны проводимости, E_v – потолок валентной зоны. Этот расчет справедлив для объемного полупроводника. Если же рассмотреть квантовую точку, то ширина запрещенной зоны в квантовой точке будет рассчитываться по следующей формуле

$$E_g = E_{g0} + E_{nR}, \quad (8)$$

где E_{g0} – ширина запрещенной зоны объемного полупроводника, E_{nR} – расстояние до соответствующего уровня размерного квантования, которое рассчитывается по формуле (4). Предполагается, что электрон совершает переход с первого уровня размерного квантования.

На рисунке 4 представлены результаты расчета спектра люминесценции квантовых точек InAs. Как видно из рис. 4, если перейти от объемного материала к квантовой точке, спектр люминесценции сдвигается в сторону более коротких длин волн из-за появления эффектов размерного квантования и соответствующего увеличения ширины запрещенной зоны.

На рис. 5 представлены результаты расчета спектра люминесценции для квантовых точек разного размера с учетом первого уровня размерного квантования. Хорошо видна динамика изменения спектра: при уменьшении размера квантовой точки максимум спектра люминесценции смещается в сторону более коротких длин волн. Таким образом, меняя размер квантовых точек, можно управлять спектральными характеристиками и получать излучение на любой, заранее заданной длине волны, в диапазоне от 1 до 3.3 мкм.

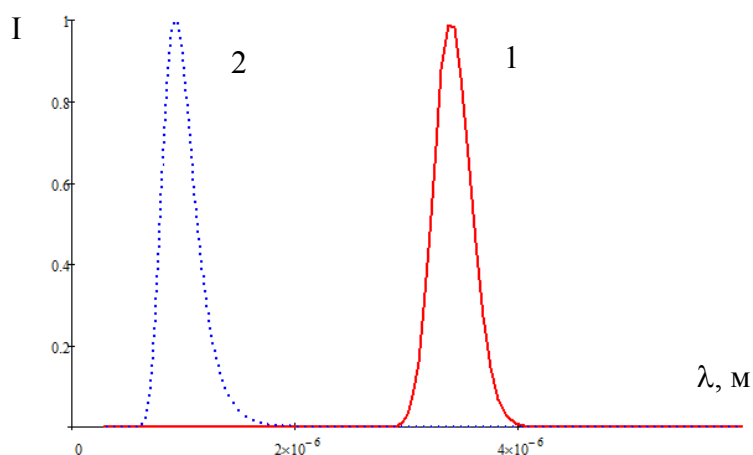


Рис. 4 – Результаты расчета зависимости интенсивности люминесценции от длины волны для квантовых точек InAs. Кривая 1: люминесценция объемного материала, кривая 2: люминесценция квантовой точки размером 2 нм

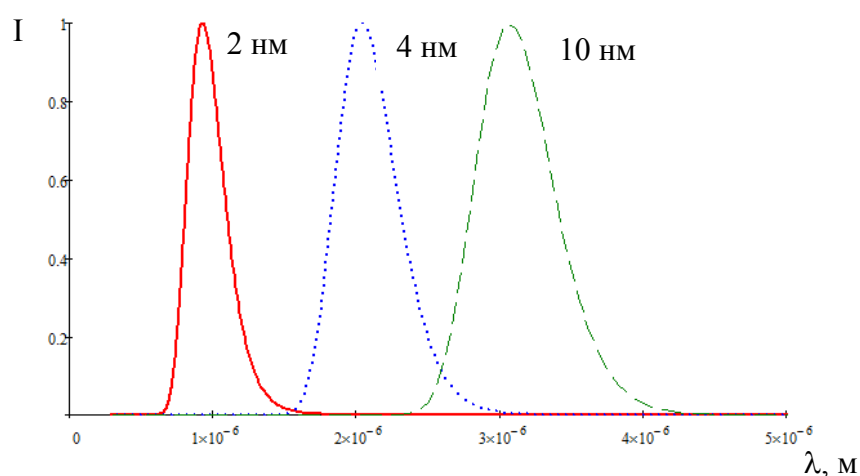


Рис. 5 – Результаты расчета зависимости интенсивности люминесценции от длины волны для квантовых точек InAs. Учет первого уровня размерного квантования

Выводы

В работе рассмотрены излучающие квантовые точки InAs. Проведены расчеты волновых функций и энергетических уровней квантовых точек InAs. Показано, что с уменьшением радиуса квантовой точки увеличивается расстояние между энергетическими уровнями. Приведены результаты расчета зависимости интенсивности люминесценции от длины волны для квантовых точек InAs сферической формы. При уменьшении размеров квантовой точки максимум спектра люминесценции смещается в сторону более коротких длин волн. Таким образом, можно отметить, что использование квантовых ям и квантовых точек является основным способом изменения спектральных характеристик гетероструктур.

Список литературы

1. Ткалич, В.Л. Физические основы нанoeлектроники: учеб. пособие для вузов / В.Л. Ткалич, А.В. Макеева, Е.Е. Оборина. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2011. – 83 с.
2. Golovkina M.V. Periodic semiconductor structures with metamaterials. Proceedings International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON-2009. Tomsk, 2009. – С. 133-137.
3. Марков, С.А. Органический синтез коллоидных квантовых точек / С.А. Марков // Окно в микромир. – 2002. – №4. – С. 18-24.
4. Смирнов, Е.В. Квантовые объекты нанотехнологий: свойства, применения, перспективы / Е.В. Смирнов // Инженерный журнал: наука и инновации. – 2013. – вып. 6. – С. 1-5.
5. Евтихийев, В.П. Излучение света полупроводниковой структурой с квантовой ямой и массивом квантовых точек / В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36, вып. 1. – С.79-86.
6. Головкина М.В. Отражение электромагнитной волны от системы сверхпроводник – полупроводник // Современные наукоемкие технологии. 2009. № 8. С. 8-10.
7. Anjana Sinha. Energy spectra of two electrons in a circular quantum dot [Электронный ресурс] / Anjana Sinha, Y. P. Varshni. – Электрон. текстовые дан. – Cornell University Library, 2002. – Режим доступа: <https://arxiv.org/pdf/quant-ph/0205186.pdf>. – Загл. с экрана.