

# ВНУТРИЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Сологуб О. Ю.

Харьковский национальный университет радиозлектроники  
пр. Ленина, 14, Харьков, 61009, Украина  
тел.: +38 (057) 7021362, e-mail: sol\_ok@mail.ru

**Аннотация** — В работе приведена модель для расчета спектра оптического поглощения квантовыми точками для случая сильного и слабого пространственного ограничения. Данная модель хорошо согласуется с экспериментальными данными и может быть использована в математических моделях, описывающих работу фотоэлектрических преобразователей на основе квантовых точек.

## I. Введение

Успехи современной электроники и перспективы ее дальнейшего развития в значительной степени связаны с использованием полупроводниковых квантово-размерных структур (квантовых ям, проволок, точек, сверхрешеток и т.д.), обладающих широким набором электрофизических параметров в актуальном диапазоне спектра. Их применение позволяет совершенствовать потребительские свойства электронных приборов, открывает возможности для создания устройств нового поколения - квантовых компьютеров, сверхчувствительных датчиков, нанороботов и т.д. [1].

Разработка нанотехнологий невозможна без понимания природы процессов, протекающих в объеме и на границах раздела материалов. Это стимулирует обширные исследования, посвященные установлению взаимосвязи электронных свойств с составом и строением твердых тел, развитию теоретических методов и физических моделей для расчета и качественного анализа электронных и колебательных спектров низкоразмерных структур. Свойства полупроводниковых наноматериалов сильно отличаются от свойств объемных материалов, носят квантовый характер и могут быть адекватно описаны лишь с применением современных методов исследования.

К исследованию полупроводниковых наноструктур привлекаются полуэмпирические методы (метод сильной связи, метод эффективной массы и т.п.), которые дают более наглядное описание с учетом основных электронных процессов. Недостатком полуэмпирических методов является то, что их параметры определяются из экспериментальных данных, которые зачастую неполны и неоднозначны, а используемые упрощения сужают область применения ограниченным энергетическим интервалом и частными случаями внешних воздействий. В связи с этим получили развитие методы, в которых стремятся соединить достоинства полуэмпирических и *ab-initio* (предсказывающих свойства мало изученных материалов без привлечения эмпирической информации) подходов [2, 3]. Потребность в описании других, многообразных наноструктур требует развития новых методов, применение которых должно быть направлено на решение актуальных проблем физики полупроводников.

Целью работы является исследование оптических свойств полупроводниковых квантовых точек, синтезированных в стеклянной матрице, что является весьма актуальным для разработки новых приборов квантовой электроники.

## II. Поглощение квантовыми точками

Исследуемая структура представляет собой квантовые точки из полупроводника с кубической

симметрией, внедренные в диэлектрическую матрицу, например, стекло. Тогда нанокристаллы в этой матрице имеют почти сферическую форму, и для описания их электронной подсистемы можно воспользоваться моделью квантовой точки с бесконечно высокими потенциальными барьерами для электронов, дырок и экситонов.

Однофотонные межзонные переходы будут приводить к поглощению света квантовыми точками. Для описания этого процесса применим двухзонную модель полупроводника [4, 5]. Вероятность перехода в единицу времени между начальным  $v_0$  и конечным  $v_1$  состояниями дискретного спектра электронной подсистемы с поглощением фотона  $h\omega$  в первом порядке теории возмущений определяется следующим выражением:

$$W = \frac{2 \cdot \pi}{\hbar} \cdot \sum_{v_1, v_0} |V_{v_1, v_0}|^2 \cdot \delta(E_{v_1} - E_{v_0} - \hbar\omega), \quad (1)$$

где  $V$ ,  $v_1$ ,  $v_0$  – матричный элемент электрон-фотонного взаимодействия, определяемый с использованием полных волновых функций.

Если полупроводниковая квантовая точка находится в режиме сильного пространственного ограничения то, для межзонного матричного элемента электрон-фотонного взаимодействия, получим

$$W_s = \frac{16 \cdot \pi^2 \cdot e^2 \cdot P^2 \cdot I}{3 \cdot \hbar^3 \cdot c \cdot \omega^2 \cdot \epsilon^{1/2}(\omega)} \cdot \sum_{n,l} (2 \cdot l + 1) \cdot \delta\left(\frac{\hbar^2 \cdot \xi_{nl}^2}{2 \cdot \mu \cdot R^2} + E_g - \hbar\omega\right) \quad (2)$$

где  $\epsilon(\omega)$  – диэлектрическая проницаемость материала квантовой точки на частоте света,  $\mu$  – приведенная масса электрона и дырки.

Для слабого пространственного ограничения

$$W_w = \frac{16 \cdot e^2 \cdot P^2 \cdot I}{3 \cdot \hbar^3 \cdot c \cdot \omega^2 \cdot \epsilon^{1/2}(\omega)} \cdot \left(\frac{2 \cdot R}{R_{ex}}\right)^3 \cdot \sum_{n,n} \frac{1}{n^2 \cdot n^3} \cdot \delta\left(\frac{\hbar^2 \cdot \pi^2 \cdot n^2}{2 \cdot M \cdot R^2} + E_n^{ex} - \hbar\omega\right) \quad (3)$$

где  $E_n^{ex} = E_g - \frac{\mu \cdot e^4}{2 \cdot \epsilon_0^2 \cdot \hbar^2 \cdot n^2}$  – энергии уровней

неподвижного объемного экситона,  $M$  – масса экситона.

Таким образом, каждый член в суммах (2) и (3) описывает отдельный однофотонный переход и оптические переходы обладают конечной спектральной шириной  $\gamma$ , которая определяется временем жизни электронов, дырок и экситонов.

Зная вероятность однофотонного перехода в единицу времени, получаем коэффициент поглощения света  $\alpha$  ансамблем идентичных квантовых точек с объемной концентрацией  $N$ :

$$\alpha_s = \frac{16 \cdot \pi^2 \cdot e^2 \cdot P^2 \cdot N}{3 \cdot \hbar^3 \cdot c \cdot \omega^2 \cdot \varepsilon^{1/2}(\omega)} \cdot \sum_{n,l} (2 \cdot l + 1) \cdot \delta \left( \frac{\hbar^2 \cdot \xi_{nl}^2}{2 \cdot \mu \cdot R^2} + E_g - \hbar\omega \right) \quad (4)$$

$$\alpha_w = \frac{16 \cdot e^2 \cdot P^2 \cdot N}{3 \cdot \hbar^3 \cdot c \cdot \omega^2 \cdot \varepsilon^{1/2}(\omega)} \cdot \left( \frac{2 \cdot R}{R_{ex}} \right)^3 \cdot \sum_{n,n} \frac{1}{n^2 \cdot n^3} \cdot \delta \left( \frac{\hbar^2 \cdot \pi^2 \cdot n^2}{2 \cdot M \cdot R^2} + E_n^{ex} - \hbar\omega \right) \quad (5)$$

### III. Заключение

Таким образом, спектр однофотонного межзонного поглощения ансамблем идентичных квантовых точек представляет собой набор линий с полушириной на полувысоте, равной  $\hbar\gamma_{nl}$  и  $\hbar\gamma_{mn}$  для сильного и слабого пространственного ограничения соответственно. Каждая линия в наборе соответствует однофотонному переходу, разрешенному правилами отбора. Следовательно, при однофотонном поглощении квантовыми точками в режиме сильного пространственного ограничения рождаются электрон и дырка с одинаковыми квантовыми числами. При поглощении света квантовыми точками в режиме слабого пространственного ограничения возникают экситоны с нулевым угловым моментом. Низкоэнергетический край поглощения квантовых точек сдвинут в сторону высоких энергий по отношению к краю поглощения в объемных материалах на величину  $\hbar^2 \cdot \pi^2 / 2 \cdot \mu \cdot R^2$  для режима сильного пространственного ограничения и на величину  $\hbar^2 \cdot \pi^2 / 2 \cdot M \cdot R^2$  для режима слабого пространственного ограничения. Из (4) видно, что при прочих равных условиях амплитуда линий в спектре поглощения квантовыми точками в режиме сильного пространственного ограничения возрастает с увеличением углового момента электронов и дырок как  $(2 \cdot l + 1)$ . В случае квантовых точек в режиме слабого пространственного ограничения (5) спектр поглощения формируется главным образом самым низкоэнергетическим переходом  $n = 1, n' = 1$ , поскольку амплитуды линий, соответствующих высокоэнергетическим переходам, убывают с ростом экситонных квантовых чисел. Кроме того, из (5) следует, что амплитуда спектра поглощения экситонами пропорциональна объему квантовой точки  $R^3$ .

### IV. Список литературы

- [1] Rossi F. Theory of Semiconductor Quantum Devices Microscopic Modeling and Simulation Strategies. - Berlin, Springer Verlag, 2011. - 380 p.
- [2] Yu, M. Local-basis quasiparticle calculations and the dielectric response function of Si clusters / M. Yu, S. E. Ulloa, D. A. Drabold // Phys.Rev.B.- 2000.- V.61. - p. 2626-2631.
- [3] Mader, K. A. Empirical atomic pseudopotentials for AlAs/GaAs superlattices, alloys, and nanostructures / K.A.Mader, A.Zunger // Phys.Rev.B.- 1994.-V.50.- P.17393-17405.
- [4] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука. Москва. 1999. С. 58–94.
- [5] A. I. Ekimov, Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots in Glass Matrix. Physica Scripta. 1991. V. 39. 217–222.

### INTRABAND ABSORPTION IN QUANTUM DOTS

Sologub O. Yu.

Kharkiv National University of Radioelectronics  
14, Lenin Ave., Kharkov, 61009, Ukraine  
tel.: +38 (057) 7021362, e-mail: sol\_ok@mail.ru

*Abstract*— This paper presents a model for calculating the optical absorption spectrum of quantum dots for cases of strong and weak spatial constraints. This model agrees well with experimental data and can be used in mathematical models describing the operation of photovoltaic cells based on quantum dots.

#### I. Introduction

The development of nanotechnology is impossible without understanding the nature of the processes occurring in bulk and at interfaces between materials. This stimulates extensive research on the establishment of the relationship of the electronic properties of the composition and structure of solids, the development of theoretical methods and physical models for the calculation and qualitative analysis of the electronic and vibrational spectra of low-dimensional structures. The properties of semiconductor nanomaterials differ from those of bulk materials, they are of the quantum nature and can be adequately described only by using modern methods. The aim is to study the optical properties of semiconductor quantum dots synthesized in a glass matrix, which is highly relevant for the development of new devices of quantum electronics.

#### II. The Absorption of Quantum Dots

The investigated structure is a quantum point of the semiconductor with cubic symmetry, embedded in a dielectric matrix, for example, glass. Nanocrystals in the matrix are almost spherical in shape, and to describe their electronic subsystem can use the model of a quantum dot with infinitely high potential barriers for electrons, holes and excitons.

#### III. Conclusion

Thus, the single-photon interband absorption spectrum of an ensemble of identical quantum dots is a set of lines with half-width at half maximum equal  $\hbar\gamma_{nl}$  и  $\hbar\gamma_{mn}$  to the strong and weak spatial constraints, respectively. Each line corresponds to the set of one-photon transition allowed by selection rules. Consequently, electron and hole are born with the same quantum numbers, when one-photon absorption of quantum dots in the strong spatial confinement takes place.