

УДК 621.315

## ПРИМЕСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ ЯДРО–ОБОЛОЧКА–ОБОЛОЧКА ИЗ ZnSe/InP/ZnS

Р.Г. ПОГОСЯН

Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

e-mail: robert.poghosyan88@gmail.com

(Поступила в редакцию 2 октября 2013 г.)

В рамках вариационного метода рассмотрены одноэлектронные примесные состояния в сферической квантовой точке ZnSe/InP/ZnS, где электроны локализованы в слое InP. Предполагается, что водородоподобная примесь находится в центре ядра КТ (ZnSe). Вычислена энергия основного примесного состояния, а также рассчитана энергия связи. Рассмотрены межзонные прямые переходы из основного валентного уровня в основной донорный уровень. Получена зависимость края поглощения от внутреннего и внешнего радиусов квантового слоя.

### 1. Введение

Теоретическое исследование физических свойств наноструктур продолжает оставаться в центре внимания специалистов, т.к. результаты этих исследований находят свое непосредственное приложение в полупроводниковых приборах на основе наноструктур. С точки зрения эффектов размерного квантования наиболее интересными объектами являются квантовые точки (КТ), в которых, благодаря размерному квантованию во всех трех направлениях, низкоразмерные эффекты выражены наиболее ярким образом. На сегодняшний день реализованы и теоретически исследованы КТ различных геометрических форм и размеров [1,2].

При теоретическом описании процессов, имеющих место в КТ, возникает необходимость правильного моделирования потенциала ограничения КТ. Необходимо учитывать геометрию и физико-химические свойства как КТ, так и окружающей ее среды. При этом, если геометрией КТ определяется симметрия гамильтониана, то физико-химические характеристики КТ и окружающей среды формируют профиль и высоту ограничивающего потенциала (см. работы [3-9]).

В последнее десятилетие были реализованы т.н. слоистые КТ ядро/оболочка, а также ядро/оболочка/оболочка, где носители могут быть локализованы как в самом ядре, так и в оболочке.

Экспериментально были реализованы слоистые квантовые точки, обла-

дающие сферической симметрией [6-9]. В частности, в работе [6] сообщается о реализации слоистых КТ InP/ZnS, которые имеют структуру типа-I. С другой стороны, структуры типа-II, такие как CdTe/CdSe [7], предоставляют широкую возможность для настройки длины волны излучения. Структуры обоих типов интенсивно изучаются в силу их настоящего и будущего широкого применения. Тем не менее, есть всего несколько примеров получения так называемых реверсных структур типа-I (CdS/HgS, CdS/CdSe, ZnSe/CdSe (см., например, [8])), у которых, в отличие от предыдущих структур, ширина запрещенной зоны материала слоя меньше, нежели ширина запрещенной зоны ядра. Однако кадмий обладает значительной токсичностью, и это ограничивает их применение. В частности, в области биомедицины, где за последние 5–10 лет слоистые КТ получили широкое применение, например, в качестве искусственных флюоресцентных с наперед заданным оптическим спектром, данное обстоятельство не может быть не учтено. В связи с этим совсем недавно были реализованы реверсные кадмий-несодержащие слоистые КТ типа-I из ZnSe/InP/ZnS [5]. Схематически вид данной КТ приведен на рис.1, где  $R_1$  и  $R_2$  – внутренний и внешний радиусы слоя InP.

В связи с вышесказанным, возникает необходимость теоретического исследования слоистых КТ.

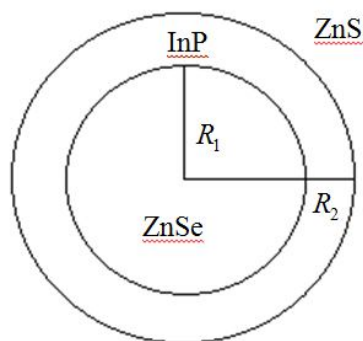


Рис.1. Слоистая КТ ZnSe/InP/ZnS.

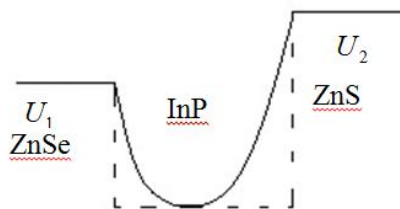


Рис.2. Энергетическая диаграмма слоистой КТ и вид ограничивающего потенциала.

В КТ типа ZnSe/InP/ZnS (см. рис.2) возникают локализованные состояния носителей в оболочке InP. В простейшем приближении ограничивающий потенциал такой системы можно предложить в рамках модели прямоугольного ограничивающего потенциала (рис.2, пунктирная линия). Однако, учет методов получения структуры, а также наличие примесей приводит к более реалистичному выбору ограничивающего потенциала [10,11]. Выбранный потенциал имеет вид

$$V(r) = \alpha r^2 + \frac{\beta}{r^2} - 2\sqrt{\alpha\beta}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – коэффициенты, обуславливающие профиль ограничения. На рис.2 данный потенциал изображен сплошной кривой. Трехмерное изображение приведенного потенциала приведено на рис.3.

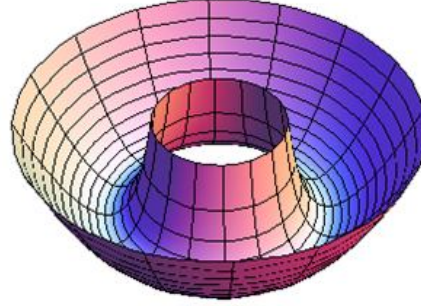


Рис.3. Трехмерный вид потенциала ограничения.

## 2. Примесные состояния и энергия связи

В рамках вариационного метода рассмотрим одноэлектронные примесные состояния в наноболочке из InP, в предположении, что в центре ядра КТ находится водородоподобная примесь. С учетом кулоновского поля гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta_r + V(r) - \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (2)$$

где  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость,  $m^*$  – эффективная масса электрона (для InP  $\epsilon = 12.4$ , а  $m^* = 0.073m_0$ ).

Тогда радиальное уравнение Шредингера будет иметь вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - V(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{e^2}{\epsilon r} \right) R(r) = 0. \quad (3)$$

Решение уравнения (3) будем искать вариационным методом. Учитывая вид волновой функции беспримесной задачи [12], пробную волновую функцию основного примесного состояния ищем в виде [11,13]

$$R_0(r) = N_0 e^{-\frac{1}{2}tr^2} r^{2s} e^{-\lambda r}, \quad (4)$$

$$N_0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi I_0}}, \quad I_0 = \int_0^\infty r^{2s+2} \exp\{-tr^2 - 2\lambda r\} dr,$$

где  $\lambda$  – вариационный параметр,  $t = \sqrt{2m^* \alpha} / \hbar$ ,  $s = \frac{1}{4} \left[ -1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8m^* \beta}{\hbar^2}} \right] -$

положительная величина.

Энергию основного состояния системы найдем из условия минимизации интеграла

$$\min_{\lambda} \int R_0(r) \hat{H} R_0(r) dV. \quad (5)$$

Учитывая (2) и (4), получим следующее выражение для энергии (безразмерное, в эффективных ридбергах):

$$\varepsilon(\lambda_0) = -A_1(\lambda_0) + A_2(\lambda_0) + A_3(\lambda_0) + A_4(\lambda_0) - 2a_0 b_0^{1/2}, \quad (6)$$

где

$$A_1 = \frac{16^s a_0^{1/2} \lambda_0}{\Gamma[3+4s] F[2+2s, 3/2, \lambda_0^2/a]} \times \left( \Gamma[1/2+2s] \left( \left( (3+8s) \frac{a_0}{\lambda_0^2} + 2 \right) {}_1F_1[1/2+2s, 1/2, \lambda_0^2/a] + 8s {}_1F_1[1/2+2s, 3/2, \lambda_0^2/a] \right) - 4s \frac{a_0^{1/2}}{\lambda_0} \Gamma[2s] \left( {}_1F_1[1+2s, 1/2, \lambda_0^2/a] + (3+8s) {}_1F_1[1+2s, 3/2, \lambda_0^2/a] \right) \right),$$

$$A_2 = \frac{(1+s)(3+4s) a_0 F[3+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]}{F[2+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]}, \quad (7)$$

$$A_3 = \frac{4a_0 (l+l^2+b_0) (4s) F[1+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]}{\Gamma[3+4s] F[2+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]},$$

$$A_4 = \frac{2a_0 F[1+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]}{\lambda_0 (1+2s) F[2+2s, 3/2, \lambda_0^2/a_0]},$$

в которых, для облегчения дальнейших расчетов, мы ввели безразмерные величины

$$\lambda_0 = \lambda a_b^*; \quad a_0 = a_b^* \sqrt{\alpha/R_y^*}; \quad b_0 = 2m^* \beta / \hbar^2.$$

Энергию основного примесного состояния получим после минимизации выражения (5)

$$E_0^{imp} = \min_{\lambda_0} \varepsilon(\lambda_0). \quad (8)$$

Далее определим энергию связи как разность

$$E_{bind} = E_0 - E_0^{imp}. \quad (9)$$

Для InP взяты следующие значения:  $m^* = 0.073m_0$ ,  $a_b^* \approx 90 \text{ \AA}$ ,  $R_y^* \approx 6.46 \text{ мэВ}$ .

На рис.4 представлена зависимость энергии электрона (в ридбергах) от ширины оболочки для случая, когда донорная примесь находится в центре КТ (в центре ядра). В данном случае фиксирован внутренний радиус при значении  $R_1 = 1$  (в единицах  $a_b^*$ ) и зависимость приведена от внешнего радиуса. Видно,

что энергия монотонно убывает с ростом ширины, причем энергия ощутимо велика при размерах  $R_2 \leq 4a_b^*$ .

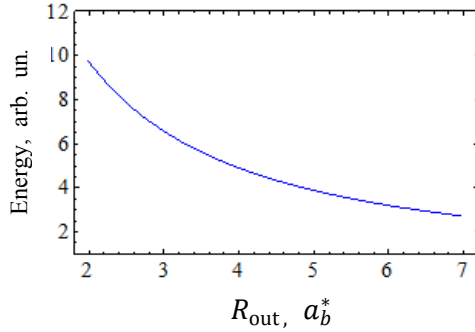


Рис.4. Энергия примесного электрона в зависимости от внешнего радиуса.

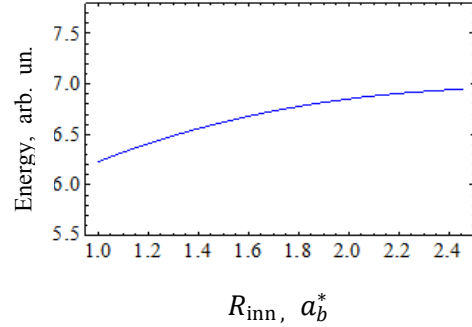


Рис.5. Энергия примесного электрона в зависимости от внутреннего радиуса.

На рис.5 приведена зависимость энергии электрона от ширины слоя, но в данном случае уже фиксирован внешний радиус при значении  $R_2 = 4a_b^*$ . Видно, что энергия уже возрастает с уменьшением ширины, причем рост энергии довольно медленный, так как в этом случае размерное квантование довольно слабое. Это результат того, что объем образца значительно больше, чем при тех же толщинах слоя, но при малых значениях радиусов.

### 3. Прямое межзонное поглощение и край поглощения

Рассмотрим поглощение, обусловленное переходами из основного уровня валентной зоны на основной донорный уровень в рассматриваемой структуре. Волновая функция основного состояния донорной примеси имеет вид

$$\psi_D = N_0 e^{-\frac{1}{2}tr^2} r^{2s} e^{-\lambda r} u_c(\mathbf{r}), \quad (10)$$

где  $t = \sqrt{2m_c\alpha}/\hbar$ , а  $m_c$  – эффективная масса электрона.

Волновую функцию валентной зоны можно записать в виде

$$\psi_v = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} e^{-\frac{\xi}{2}\zeta^s} F\left(-n, 2s + \frac{3}{2}, \xi\right) u_v(\mathbf{r}), \quad (11)$$

где  $\xi = \frac{\sqrt{2m_v\alpha}}{\hbar} r^2$ ,  $m_v$  – эффективная масса дырки.

Матричный элемент, обусловленный переходом из основного валентного уровня на основной донорный уровень, может быть записан в виде

$$M_{00} = \int \psi_D(\mathbf{r}) H' \psi_{v,0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (12)$$

где гамильтониан электромагнитного возмущения

$$H' = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \hat{\mathbf{p}} = \frac{e}{mc} A_0 \boldsymbol{\eta} e^{i\mathbf{x}\cdot\boldsymbol{\eta}} (-i\hbar\nabla), \quad (13)$$

где  $\boldsymbol{\eta}$  – единичный вектор,  $\boldsymbol{\chi}$  – волновой вектор электромагнитной волны.

Подставив волновые функции, после некоторых преобразований для матричного элемента получим

$$M_{00} = A(\boldsymbol{\eta} \boldsymbol{p}_{cv}) \int_0^{\infty} r^{2(s'+s+1)} e^{-\frac{\gamma}{2}r^2 - \lambda r} dr, \quad (14)$$

$$A = \frac{eA_0}{mc} \frac{1}{I_0^{1/2}} \alpha_{20}^{s'/2} \left( \frac{m_v}{m_c} \alpha_{10} \right)^{s/2}; \quad \gamma = \alpha_{20}^{1/2} + \left( \frac{m_v}{m_c} \alpha_{10} \right)^{1/2}.$$

Вычисляя интеграл в уравнении (14), для матричного элемента получим

$$M_{00} = A\gamma^{-s'-s-\frac{1}{2}} \Gamma(2(s'+s)+3) \exp\left(\frac{\lambda^2}{4\gamma}\right) D_{-2(s'+s)+3}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\gamma}}\right). \quad (15)$$

Коэффициент поглощения света определяется по формуле [14]

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 c}{N\omega v} \frac{|M_{00}|^2}{|A_0|^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (16)$$

где  $A_0$  – амплитуда,  $\omega$  и  $v$  – частота и фазовая скорость электромагнитной волны.

Для пороговой частоты поглощения получим

$$W_{00} = E_0^{imp} + E_0^v + \hbar\omega, \quad (17)$$

где  $E_0^{imp}$  – энергия основного примесного состояния, определяемая из минимизации выражения (9),  $E_0^v$  – энергия основного состояния в валентной зоне, определяемая выражением [12]

$$E_0^v = \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{2m_v}} \left[ 2 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8m_v\beta}{\hbar^2}} \right]. \quad (18)$$

#### 4. Обсуждение результатов

Численные расчеты сделаны для InP со следующими параметрами:  $m^* = 0.073m_0$ ,  $a_b^* = 90\text{\AA}$ ,  $R_y^* = 6.46$  мэВ.

На рис.ба и б приведены зависимости порогов поглощения, соответственно, от внутреннего и внешнего радиусов квантового слоя. Как видно из рисунков, с увеличением внутреннего радиуса край поглощения увеличивается. Это является следствием того, что с уменьшением толщины слоя ширина эффективной запрещенной зоны увеличивается. Обратная картина наблюдается при увеличении внешнего радиуса рассматриваемой структуры. В этом случае ширина эффективной запрещенной зоны уменьшается, так как ширина слоя увеличивается. Резюмируя вышесказанное, отметим, что увеличение внутреннего радиуса приводит к “синему” смещению пороговых частот, а увеличение внешнего радиуса – к “красному” смещению пороговых частот.

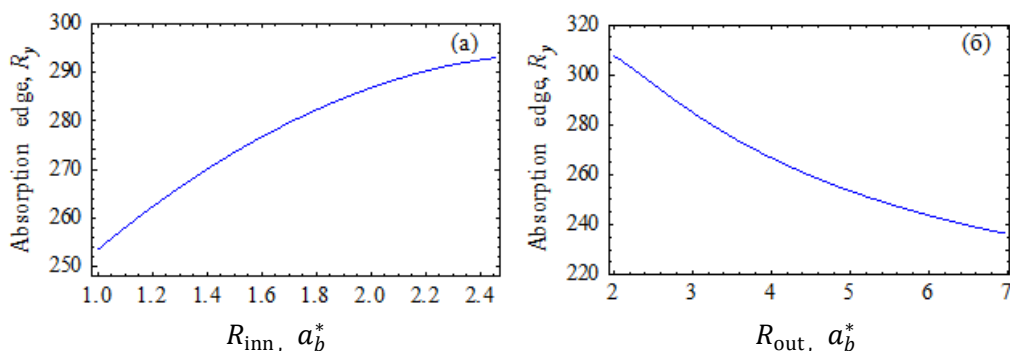


Рис.6. Зависимость края поглощения от а) внутреннего радиуса слоя при фиксированном значении внешнего радиуса, б) внешнего радиуса слоя при фиксированном значении внутреннего радиуса.

Автор выражает благодарность научному руководителю Э.М. Казаряну, а также А.А. Костяняну за полезные обсуждения и помощь в работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A.Lorke, R.J.Luyken, A.O.Govorov, J.Kotthaus. Phys. Rev. Lett., **84**, 2223 (2000).
2. K.G.Dvovyan, E.M.Kazaryan, L.S.Petrosyan. Physica E, **28**, 333 (2005).
3. J.-L.Zhu, D.-H.Tang, J.-J.Xiong. Phys. Rev. B, **39**, 8609 (1989).
4. P.A.Maksym, T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., **65**, 108 (1990).
5. Э.М.Казарян, А.А.Костянян, А.А.Саркисян. Изв. НАН Армении, Физика, **42**, 145 (2007).
6. X.Peng, D.Battaglia. Nano Letters, **2**, 1027 (2002).
7. K.Yu, B.Zaman, S.Romanova, D.Wang, J.A.Ripmeester. Small, **1**, 332 (2005).
8. M.Braus, C.Burda, M.A.El-Sayed. J. Phys. Chem. A, **105**, 5548 (2001).
9. S.Kim, J.Park, T.Kim, E.Jang, S.Jun, H.Jang, B.Kim. Small, **7**, 70 (2011).
10. A.K.Atayan, E.M.Kazaryan, A.V.Meliksetyan, H.A.Sarkisyan. J. Comp. and Theor. Nanoscience, **7**, 1 (2010).
11. E.M.Kazaryan, A.A.Kostanyan, R.G.Poghosyan. J. of Physics: Conference Series, **350** (1), 012020 (2012).
12. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., Наука, 1989.
13. Zh.Xiao, J.Zhu, F.He. J. Appl. Phys., **79**, 12 (1996).
14. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.

#### IMPURITY ABSORPTION IN ZnSe/InP/ZnS SPHERICAL LAYERED QUANTUM DOT

R.G. POGHOSYAN

Impurity states in ZnSe/InP/ZnS core/shell/shell spherical quantum dot are considered using variational method. Considering the band structure of the system it is assumed that electron is localized in the first InP shell. The impurity ground state wave function and energy, as well as electron binding energy are obtained using the variational method. It is assumed that the impurity is located in the center of quantum dot core (ZnSe). Optical transitions between ground valence state and ground donor state are considered. Absorption edge dependences on the internal and external radii are derived.