

01,02,03

Локализация носителей в квантовых точках с одноосной анизотропией формы и состава

© М.А. Семина, А.А. Головатенко, Т.В. Шубина, А.В. Родина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: msemina@gmail.com

(Поступила в Редакцию 10 декабря 2018 г.

В окончательной редакции 10 декабря 2018 г.

Принята к публикации 11 декабря 2018 г.)

Представлены результаты теоретического исследования электронных и дырочных состояний в квантовых точках (КТ) на основе кубических полупроводников II–VI сфероидальной формы, характеризующихся одноосной анизотропией. Рассмотрены гладкие потенциальные энергетические профили, моделируемые функцией Гаусса во всех трех пространственных направлениях. Проанализировано понижение уровня энергии, а также расщепление по энергии четырехкратно вырожденного состояния дырок из вершины валентной зоны Γ_8 с моментом $3/2$ на состояния с проекциями $\pm 3/2$, $\pm 1/2$ на ось анизотропии. Рассмотрена анизотропия КТ трех видов: анизотропия размера КТ, анизотропия потенциального барьера КТ и комбинированная анизотропия. В первом случае рассмотрены сплюснутые квантовые точки, характерный размер которых в плоскости структуры больше чем размер вдоль оси анизотропии. Во втором случае рассмотрены КТ, в которых высота потенциального барьера в плоскости меньше, чем высота потенциального барьера вдоль оси анизотропии. В третьем случае рассмотрены сплюснутые квантовые точки с анизотропией как размера так и потенциального барьера. Установлены условия локализации носителей заряда внутри КТ и обсуждаются влияния анизотропии формы и состава на энергии экситонных переходов структур с квантовыми точками $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-22-00107).

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47405.335

1. Введение

Твердотельные квантовые точки (КТ) считаются почти идеальными источниками квантового света, а именно одиночных и запутанных фотонов, благодаря фундаментальному ограничению числа носителей на одном квантовом уровне, строго определенной энергии излучения изолированной точки, быстрому времени экситонной рекомбинации, обеспечивающим высокую эффективность излучения, и простоте интеграции в фотонные схемы [1]. Помимо крайне востребованной квантовой связи на телекоммуникационных длинах волн, рассматриваются такие сферы применения однофотонных источников как реализация кубитов квантово-вычислительных устройств, преодоление классического дифракционного предела в устройствах интерференционной литографии и уменьшение повреждения клеток при микроскопии биологических систем [2–4]. Демонстрация большинства потенциальных применений была осуществлена с использованием гетероструктур с эпитаксиальными КТ InAs/GaAs [5], на основе которых были созданы наиболее яркие источники одиночных фотонов, резонансно накачиваемые через верхние возбужденные уровни [6]. Однако целый ряд применений, включая атмосферные оптические линии связи и высокочувствительную интерферометрическую диагностику, не согласуется с оптимальным для этих точек спектральным диапазоном (900–1000 nm). Более того, повышение быстродействия

систем квантовой оптики требует, как правило, уменьшения рабочих длин волн. Поэтому активно исследуются КТ, излучающие в видимой области спектра, выполненные на основе других материальных систем, в частности соединений групп II–VI [7–10].

С конца 1990-ых годов в фокусе внимания исследователей были II–VI КТ, получаемые методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) путем вставки дробного количества монослоев CdSe или CdTe в матрицу на основе ZnSe [11,12]. На начальном этапе свойства таких КТ во многом напоминали свойства разупорядоченных квантовых ям [7–9]. Однако совершенствование в течении более десяти лет технологии МПЭ позволило создать массивы изолированных II–VI точек с низкой поверхностной плотностью. На основе таких одиночных КТ в нескольких научных группах были созданы источники одиночных фотонов [13]. Однако ожидаемый для широкозонных КТ прогресс на поприще создания однофотонных источников, работающих при комнатной температуре, был весьма скромным. Достигнутые результаты были плохо воспроизводимыми, интенсивность однофотонного излучения была низкой, а корреляционная функция второго порядка была на уровне $g^{(2)}(0) \simeq 0.16$ [8]. Эти результаты не были неожиданными. Интенсивность узких линий экситонной фотолюминесценции (ФЛ) в II–VI КТ резко падает с ростом температуры [14] при достаточной, на первый взгляд, энергии локализации носителей. Это объяснялось сильным экситон-фононным

взаимодействием в широкозонных II–VI точках [15,16]. Однако факт получения, при тщательном контроле ростовых параметров, однофотонного излучения из таких КТ при комнатной температуре свидетельствует о том, что должен быть, по крайней мере, еще один фактор, причем не столь общего характера, как экситон-фононное взаимодействие.

Мы полагаем, что причина резкого различия между КТ III–V и II–VI лежит отчасти в их морфологии. Канонические InAs точки имеют форму, близкую к пирамидальной с четко очерченными границами раздела с окружающей матрицей [17]. Композиционно материал точек однороден, так же как и материал смачивающего слоя, на котором они располагаются. Отличительная черта КТ CdSe/ZnSe КТ — это одноосная анизотропия: характерные размеры точек — 2–4 нм в направлении роста и 6–10 нм в плоскости. Ей сопутствует композиционная неоднородность: содержание Cd максимально в центре квантовой точки, где оно достигает 80–100%, будучи в 2–3 раза меньше на краях. Причем, резкость границ различна в направлении роста (не более 2–3 постоянных решетки) и в плоскости роста, где градиент изменения состава более плавный и только в редких случаях выходит на чистый ZnSe [18–20]. Форма точек напоминает сплюснутый сфероид, и моделирующий потенциал не может быть выбран жестким. Характерное изображение КТ CdSe/ZnSe, полученное просвечивающей электронной микроскопией с высоким разрешением (HR TEM), и ее аппроксимация сплюснутым сфероидом приведены на рис. 1. Усовершенствованные методы эпитаксии, к примеру, метод формирования КТ с температурной активацией [21], уменьшают, но не ликвидируют полностью анизотропию и композиционную неоднородность точек.

Ранее нами было показано, что поверхностная плотность точек определяет ширину полосы ФЛ, поскольку уменьшение расстояния между точками способствует резонансному переносу энергии и селекции излучающих КТ [21,22]. Анализ результатов оптических исследований опирался на численный расчет уровней энергии электронов и дырок в сферических QDs с гауссовым потенциальным профилем [22]. Теоретическое моделирование плавного потенциала сфероидальных КТ с помощью функции Гаусса и анализ зависимости энергии основного уровня квантования электронов и дырок от параметров потенциала и материала были впервые выполнены в работе [24]. При этом была учтена аксиальная анизотропия КТ, обусловленная разницей ее размеров в плоскости и вдоль оси роста, однако потенциальный барьер для носителей предполагался одинаковым во всех трех направлениях. В рамках такого подхода были исследованы два первых уровня размерного квантования в различных потенциалах [25]. Рассмотрение влияния анизотропии КТ, связанной с композиционной неоднородностью, а именно, с разницей потенциальных барьеров для носителей в плоскости КТ и вдоль оси роста, на локализацию носителей ранее не проводилось.

В данной работе ставится задача рассмотрения локализации электронов и дырок в градиентных сфероидаль-

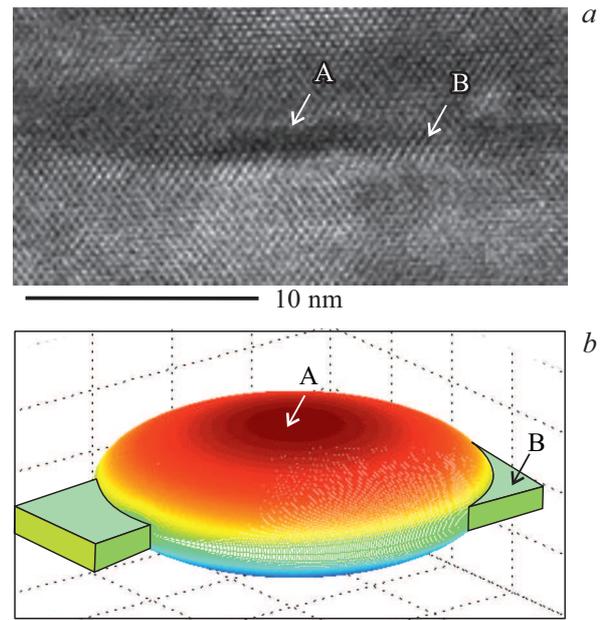


Рис. 1. (a) Типовое изображение квантовой точки CdSe/ZnSe, выращенной МПЭ, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии с высоким разрешением. (b) Схематическое изображение точки в виде сплюснутого сфероида. Области А и В соответствуют высокой (в точке) и низкой (в прилегающих областях) концентрации Cd. (Авторы благодарны С. Рувимову за возможность предоставить HR TEM изображение CdSe/ZnSe КТ.

ных квантовых точках с учетом различия размеров и высоты барьеров вдоль оси роста структуры и в ее плоскости. В общем случае это соответствует анизотропии КТ трех типов: анизотропии размера КТ, анизотропии потенциального барьера КТ и комбинированной анизотропии. Для трех типов анизотропных КТ будут определены распределение плотности заряда в плоскости и условия локализации носителей заряда внутри КТ. Поскольку наиболее эффективным методом накачки является резонансное возбуждение, будет уделено внимание условиям существования верхних возбужденных уровней в таких объектах.

2. Теоретическая модель

А. Моделирование потенциального профиля квантовой точки

Мы рассматриваем квантовые точки $Cd_xZn_{1-x}Se$ в матрице ZnSe, характеризуемые плавным изменением концентрации Cd от максимального значения, x , в центре точки и до x^* за пределами точки. В сферически симметричном случае предполагается что $x^* = 0$ во всех направлениях, и потенциальный профиль квантовых точек (КТ) для электронов и дырок моделируется с помощью

сферически симметричного потенциала Гаусса как

$$V_{e,h}(r) = V_{\text{off}}^{e,h}(x - x^*) \left[1 - \exp\left(-\frac{4r^2}{d^2}\right) \right], \quad (1)$$

Здесь $V_{\text{off}}^{e,h}(x - x^*)$ — потенциальные барьеры для электронов и дырок, зависящие от концентрации Cd в центре точки x , а d — характерный размер КТ. Рассчитанные согласно [26] зависимости $V_{\text{off}}^{e,h}(x) = \eta_{e,h} [E_g(0) - E_g(x)]$ при $\eta_e = 0.75$, $\eta_h = 0.25$ и $E_g(x) = (1 - x)E_g(0) + xE_g(1) - 0.387x(1 - x)$ показаны на рисунке рис. 2. Здесь $E_g(0) = 2.82$ eV — величина запрещенной зоны ZnSe и $E_g(1) = 1.74$ eV — величина запрещенной зоны CdSe при температуре 0 К. Если концентрация Cd снаружи точки равна x^* , потенциальный барьер может быть найден как $V_0^{e,h} = V_{\text{off}}^{e,h}(x - x^*) = \eta_{e,h} [E_g(x^*) - E_g(x)] = V_{\text{off}}^{e,h}(x) - V_{\text{off}}^{e,h}(x^*)$. Таким образом, варьирование $x^* \neq 0$ позволяет учесть ненулевую концентрацию Cd между КТ в плоскости структуры, приводящую к понижению потенциального барьера по сравнению с потенциальным барьером вдоль оси роста.

Потенциал (1) соответствует нулевой энергии в центре КТ и энергии $V_{\text{off}}^{e,h}$ для электронов и дырок, соответственно, на расстоянии примерно $d = 2a$ от центра точки. Мы будем считать, что a — эффективный радиус точки (соответствует потенциальной энергии примерно $0.6V_{\text{off}}^{e,h}$), d имеет смысл характерного диаметра квантовой точки. На расстоянии $r \ll a$ от центра КТ потенциал (1) может быть аппроксимирован потенциалом гармонического осциллятора:

$$V_{e,h}(r) \approx \frac{\kappa_{e,h} r^2}{2}, \quad (2)$$

где $\kappa_{e,h} = 2V_{\text{off}}^{e,h}/a^2$ — жесткости соответствующих осцилляторов.

В работе мы используем приближение сильного размерного квантования, в котором электрон и дырка кван-

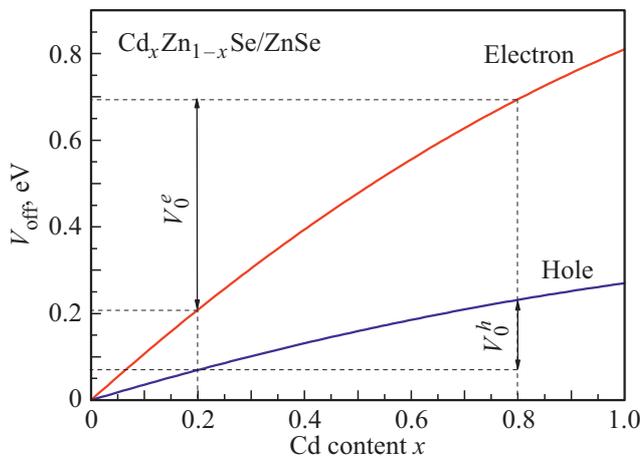


Рис. 2. Зависимость $V_{\text{off}}^{e,h}$ для электронов и дырок от концентрации кадмия x в центре квантовой точки $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$. Стрелками показано определение потенциального барьера $V_0^{e,h}$ для электронов и дырок в плоскости при значениях концентрации Cd $x = 0.8$ в центре КТ и $x^* = 0.2$ между КТ в плоскости.

туются в квантовой точке независимо, а кулоновское взаимодействие можно рассматривать как возмущение. Мы моделируем сплюснутые анизотропные КТ трех характерных типов, следующими способами:

1) Предполагаем что концентрация Cd снаружи КТ $x^* = 0$ во всех направлениях, однако характерный размер КТ в плоскости больше, чем характерный размер вдоль направления z . В этом случае потенциалы могут быть записаны как

$$V_{e,h}(r) = V_{\text{off}}^{e,h}(x) \left[1 - \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{a_x^2} - \frac{z^2}{a_z^2}\right) \right], \quad (3)$$

В центре КТ такой потенциал имеет вид

$$V_{e,h}^d(r) \approx \kappa_{e,h}^x \frac{x^2 + y^2}{2} + \kappa_{e,h}^z \frac{z^2}{2}, \quad (4)$$

где $\kappa_{e,h}^x = 2V_{\text{off}}^{e,h}/a_x^2$ и $\kappa_{e,h}^z = 2V_{\text{off}}^{e,h}/a_z^2$.

2) Предполагаем, что характерный размер КТ одинаковый во всех направлениях, однако распределение концентрации анизотропно: концентрация Cd снаружи КТ $x^* = 0$ в направлении z и $x^* \neq 0$ в плоскости. Этот случай мы моделируем следующим потенциалом:

$$V_{e,h}(r) = V_0^{e,h} \left[1 - \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \right] + \Delta V^{e,h} \left[1 - \exp\left(-\frac{z^2}{a^2}\right) \right],$$

$$V_0^{e,h} + \Delta V^{e,h} = V_{\text{off}}^{e,h}. \quad (5)$$

Здесь $\Delta V^{e,h} = V_{\text{off}}^{e,h}(x^*)$ и $V_0^{e,h} = \eta_{e,h} [E_g(x^*) - E_g(x)] = V_{\text{off}}^{e,h}(x) - V_{\text{off}}^{e,h}(x^*)$ — потенциальный барьер в плоскости. В центре КТ такой потенциал также имеет вид (4), где $\kappa_{e,h}^x = 2V_0^{e,h}/a^2$ и $\kappa_{e,h}^z = 2V_{\text{off}}^{e,h}/a^2$.

3) В третьем случае мы комбинируем анизотропию размера, состава и выбираем потенциальный профиль в виде:

$$V_{e,h}(r) = V_0^{e,h} \left[1 - \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{a_x^2} - \frac{z^2}{a_z^2}\right) \right] + \Delta V^{e,h} \left[1 - \exp\left(-\frac{z^2}{a_z^2}\right) \right],$$

$$V_0^{e,h} + \Delta V^{e,h} = V_{\text{off}}^{e,h}. \quad (6)$$

В центре КТ такой потенциал также имеет вид (4), где $\kappa_{e,h}^x = 2V_0^{e,h}/a_x^2$ и $\kappa_{e,h}^z = 2V_{\text{off}}^{e,h}/a_z^2$.

При решении задачи мы также считаем, что массы носителей заряда не зависят от координаты во всем объеме КТ, что оправдано в силу малой разницы между эффективными массами электрона и дырки в кубических модификациях CdSe и ZnSe. Параметры структур $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ для некоторых значений x , представлены в таблице.

В. Расчет уровней энергии электронов и дырок

Уровни энергии электронов, E_e , и дырок, E_h , в КТ с соответствующими потенциальными профилями $V_{e,h}^{\text{sp,ax}}(r)$

Параметры структур $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ при температуре 0 К. Значения эффективных масс получено при помощи линейной интерполяции между значениями для чистых ZnSe и CdSe.

x	$E_g(x)$, eV	V_{off}^c , eV	V_{off}^h , eV	m_e/m_0	m_l/m_0	m_h/m_0	β
0.	2.82	0.0	0.0	0.16	0.145	0.6	0.24
0.2	2.46	0.21	0.07	0.154	0.145	0.57	0.254
0.5	2.18	0.48	0.16	0.145	0.145	0.525	0.275
0.8	1.9	0.69	0.23	0.136	0.145	0.48	0.3
1	1.74	0.81	0.27	0.13	0.145	0.45	0.32

могут быть найдены в результате решения уравнений Шредингера

$$[\hat{H}_{e,h} + V_{e,h}(r)] \Psi_{e,h}(\mathbf{r}) = E_{e,h} \Psi_{e,h}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Гамильтониан электрона \hat{H}_e рассмотрен в рамках однозонной модели с изотропной эффективной массой:

$$\hat{H}_e = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m_e}, \quad (8)$$

где $\hat{k} = -i\nabla$ — оператор волнового вектора, и m_e — эффективная масса электрона. В сферически симметричном случае и при больших значениях V_{off}^c собственные состояния такого гамильтониана приближаются к собственным состояниям гармонического осциллятора [24]. Для того, чтобы иметь единые единицы измерения длины и энергии, выбираем в качестве единиц измерения длину L_e и энергию E_0^e осциллятора с жесткостью $\kappa = \kappa_z$ в центре КТ:

$$L_e^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa_e m_e}} = a^2 \sqrt{\frac{E_k^c}{V_{\text{off}}^c}}, \quad E_k^c = \frac{\hbar^2}{2m_e a^2}, \quad (9)$$

$$E_0^e = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_e L_e^2} = 3V_{\text{off}}^c \sqrt{\frac{E_k^c}{V_{\text{off}}^c}}. \quad (10)$$

Отметим, что зависимость энергии уровней электрона от размера квантовой точки a содержится в зависимости характерной энергии осциллятора $E_0 \propto 1/a$.

Состояния дырки в вершине валентной зоны Γ_8 кубической модификации полупроводника II–VI могут быть описаны в рамках четырехзонного Гамильтониана Латтинжера [27,28]:

$$\hat{H}_h = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) \hat{k}^2 - 2\gamma (\hat{\mathbf{k}}\mathbf{J})^2 \right]. \quad (11)$$

Здесь \mathbf{J} — оператор собственного углового момента дырки $J = 3/2$, γ_1 и $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$ — параметры Латтинжера, связанные с массами легкой, m_l , и тяжелой, m_h , дырок соотношениями $m_{l,h} = m_0/(\gamma_1 \pm 2\gamma)$ (m_0 — масса свободного электрона). Здесь мы пренебрегаем

гофрировкой валентной зоны и используем сферическое приближение для гамильтониана Латтинжера, так как малые эффекты кубической симметрии кристалла не имеют существенного влияния на положение уровней дырки.

В случае сферически симметричного потенциала квантовой точки основное состояние дырки характеризуется полным угловым моментом $\mathbf{j} = 3/2$ и четырехкратно вырождено по значению проекции момента $M = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ на ось z [28]. Энергия вырожденного состояния дырки в КТ, как в случае плавного, так и в случае жесткого потенциалов, может быть найдена в характерных единицах энергии размерного квантования в виде универсальной зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\beta = m_l/m_h$ [24,29,30]. В случае $\beta = 1$, что соответствует простой зоне, задача нахождения уровней дырки полностью аналогична задаче об уровнях электрона, если использовать в качестве единиц измерения единицы, аналогичные электронным с заменой m_e на массу тяжелой дырки m_h :

$$L_h^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa_h m_h}}, \quad E_0^h = \frac{3}{2} \frac{\hbar^2}{m_h L_h^2}. \quad (12)$$

В безразмерных единицах рассматриваемые потенциалы, $v = V_{e,h}/E_0$, могут быть записаны в общем виде как

$$v(r_{e,h}) = \frac{1}{\xi_p} v_{\text{off}} \left[1 - \exp \left(-\frac{\rho_{e,h}^2}{3\xi_s v_{\text{off}}} - \frac{z_{e,h}^2}{3v_{\text{off}}} \right) \right] + \frac{\xi_p - 1}{\xi_p} v_{\text{off}} \left[1 - \exp \left(-\frac{z_{e,h}^2}{3v_{\text{off}}} \right) \right]. \quad (13)$$

Здесь $\rho_{e,h}^2 = (x^2 + y^2)/L_{e,h}^2$, $z_{e,h} = z/L_{e,h}$, $v_{\text{off}} = V_{\text{off}}^{e,h}/E_0^{e,h}$ — безразмерная высота потенциального барьера, и параметр анизотропии $\xi_p \xi_s = \xi^{e,h} = \kappa_z^{e,h}/\kappa_x^{e,h} > 1$ для сплюснутых КТ.

Безразмерные потенциальные профили, моделируемые с помощью выражения (13) при $v_{\text{off}} = 2$, показаны на рис. 2, а. Для наглядности, мы выбрали КТ с одинаковыми потенциалами вдоль оси роста структуры z . Параметры анизотропных точек в плоскости структуры выбраны так, чтобы анизотропия жесткости потенциалов КТ вблизи их центра была одинаковой: $\kappa_{e,h}^x = \kappa_{e,h}^y = \kappa_{e,h}^z/\xi$ для $\xi = \xi_p \xi_s = 2$. Черная сплошная кривая показывает сферически-симметричный потенциал. Красными (точки), синими (штрихи) и розовыми (штрих-пунктир) кривыми показаны зависимости потенциалов от безразмерной координаты вдоль оси x для $\xi_s = 2$ (анизотропия только размера КТ), $\xi_s = \xi_p = \sqrt{2}$ (комбинированная анизотропия), и $\xi_p = 2$ (анизотропия только потенциального барьера КТ).

Для рассматриваемых потенциалов $v(r)$, как сферического так и аксиально симметричного, точного аналитического решения задачи ни для $\beta = 1$, ни для $\beta < 1$ не существует. Мы применили численный метод решения, описанный подробно в работе [24] и применимый как для

сферически, так и для аксиально симметричного потенциалов. Для нахождения собственных энергий и функций гамильтониана (7) мы диагонализуем его матрицу, вычисленную на ортонормированном базисе волновых функций аксиально анизотропного гармонического осциллятора. Таким образом, при достаточном размере базиса можно получить с высокой точностью не только энергию и волновую функцию основного состояния но и энергии и волновые функции возбужденных состояний.

3. Результаты

А. Условия локализации в сферических КТ

Для модельного сферически-симметричного потенциала с потенциальным барьером $v_{\text{off}} = 2$ на рис. 3, а

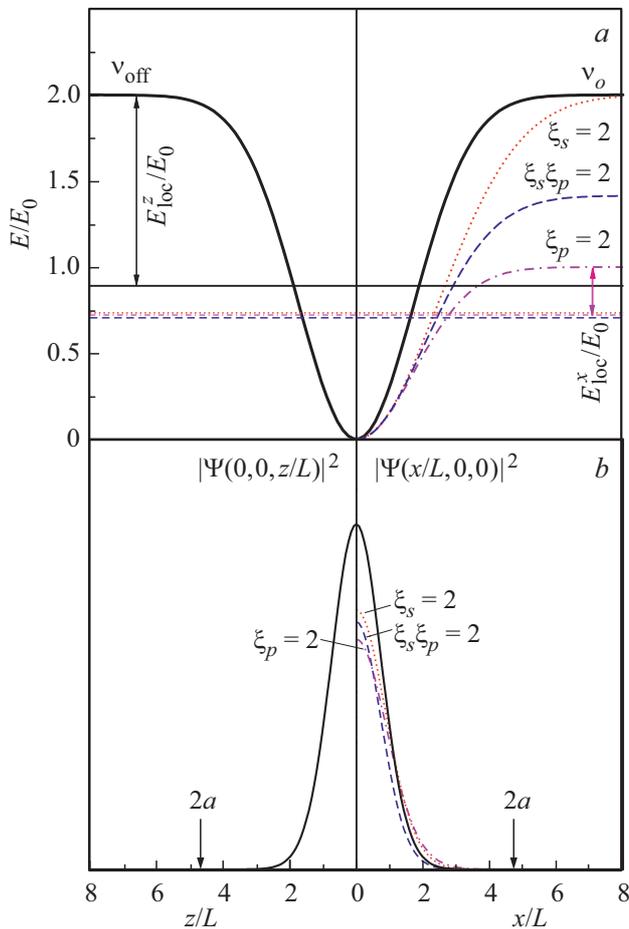


Рис. 3. (а) Безразмерные потенциальные профили аксиально анизотропных КТ, моделируемые с помощью выражения (13) при $v_{\text{off}} = 2$, и уровни энергии в единицах E_0 , рассчитанные для $\beta = 1$. Горизонтальные линии показывают соответствующие энергии. Левая панель — профиль потенциала КТ вдоль оси z , правая панель — профиль потенциала КТ вдоль оси x (в плоскости структуры); (б) Пространственное распределение квадрата модуля волновой функции для потенциалов, показанных на панели (а). Стрелками показан удвоенный характерный размер КТ вдоль оси z .

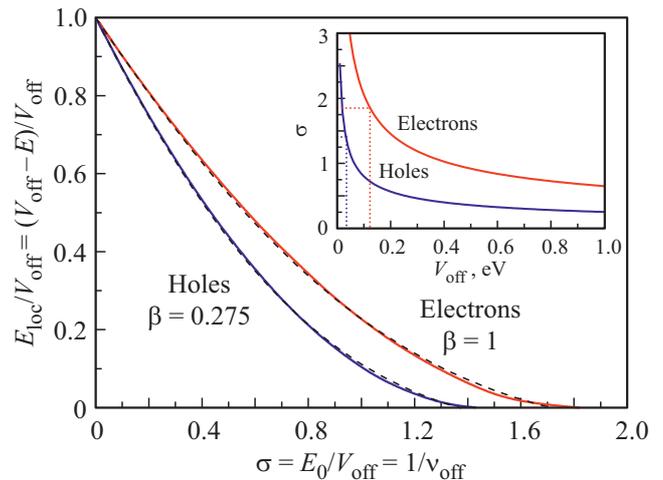


Рис. 4. Зависимости $E_{\text{loc}}^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h} = (V_{\text{off}}^{e,h} - E_{e,h})/V_{\text{off}}^{e,h}$ для электронов и дырок ($\beta = 0.275$) от безразмерного параметра $\sigma^{e,h} = E_0^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h} = 3\sqrt{E_k^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h}}$. Штриховыми линиями показаны аппроксимирующие зависимости согласно $E_{\text{loc}}^e/V_{\text{off}}^e \approx 1 - \sigma/(1 + 0.125\sigma + 0.17\sigma^2)$ и $E_{\text{loc}}^h/V_{\text{off}}^h \approx 1 - 1.335\sigma/(1 + 0.22\sigma + 0.27\sigma^2)$. На вставке показаны зависимости безразмерного параметра $\sigma = 1/v_{\text{off}}$ для электронов с массой $m_e = 0.5m_0$ (красная кривая) и дырок с массой $m_h = 0.53m_0$ (синяя кривая) от величины потенциального барьера V_{off} в диапазоне от 0.1 до 1 eV для КТ диаметром $d = 3$ nm. Пунктирные линии на вставке показывают пороговые значения V_{off} и σ при которых локализация электрона и дырки пропадают.

сплошной кривой показаны безразмерный уровень энергии основного состояния электрона $\epsilon = E_e/E_0$ и его безразмерная энергия локализации $E_{\text{loc}}/E_0 = v_{\text{off}} - E/E_0$. На рис. 3, б показано распределение плотности вероятности для электрона в такой КТ. Из рисунка можно видеть, что волновая функция хорошо локализована на размере удвоенного характерного размера квантовой точки.

Зависимости энергии основного уровня электронов и дырок $\epsilon = E^{e,h}/E_0^{e,h}$ от величины потенциального барьера $v_{\text{off}} = V_{\text{off}}^{e,h}/E_0^{e,h}$ в сферически симметричном потенциале Гаусса были представлены в работе [24]. Здесь мы представляем обобщение анализа условий локализации электронов и дырок в сферических КТ $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}/\text{ZnSe}$ разного диаметра d и при разных значениях x в центре КТ, соответствующих разным значениям $V_{\text{off}}^{e,h}$. На рис. 4 построены безразмерные зависимости $E_{\text{loc}}^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h} = (V_{\text{off}}^{e,h} - E^{e,h})/V_{\text{off}}^{e,h}$ для электронов и дырок ($\beta = 0.275$, что соответствует $x = 0.5$) от безразмерного параметра $\sigma = 1/v_{\text{off}} = E_0^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h} = 3\sqrt{E_k^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h}}$. Результаты точных расчетов хорошо аппроксимируются зависимостями $E_{\text{loc}}^e/V_{\text{off}}^e \approx 1 - \sigma/(1 + 0.125\sigma + 0.17\sigma^2)$ для электронов и $E_{\text{loc}}^h/V_{\text{off}}^h \approx 1 - 1.335\sigma/(1 + 0.22\sigma + 0.27\sigma^2)$ для дырок (при $\beta = 0.275$).

Видно, что электроны и дырки хорошо локализируются в КТ при выполнении условия $\sigma < 1$ ($E_0 < V$

или $v_{\text{off}} > 1$). Для конкретных КТ энергии локализации электронов и дырок можно оценить, определив значение параметров $\sigma^{e,h} = 3\sqrt{E_k^{e,h}/V_{\text{off}}^{e,h}}$ для заданных размерных значений V_{off} и диаметра d . На вставке на рис. 4 построены зависимости $\sigma^{e,h}$ от V_{off} в КТ диаметром $d = 3 \text{ nm}$ для электронов с $m_e/m_0 = 0.15$ и дырок с $m_h/m_0 = 0.53$, соответственно. Для КТ с другим характерным диаметром параметр $\sigma \propto d$, и значение E_0 может быть найдено как σV_{off} .

Локализованное состояние электронов или дырок в КТ исчезает при $\sigma_e > 1.8$ и $\sigma_h > 1.4$ соответственно. Это соответствует пороговым значениям потенциальных барьеров $v_{\text{off}}^e \approx 0.56$ и $v_{\text{off}}^h \approx 0.71$ или $V_{\text{off}}^e \approx 0.13 \text{ eV}$ и $V_{\text{off}}^h \approx 0.035 \text{ eV}$ в КТ с характерным диаметром $d = 3 \text{ nm}$ (показано пунктирными линиями на вставке на рис. 4). При увеличении d пороговые значения потенциальных барьеров, ниже которых локализация носителей отсутствует, или понижаются, что, очевидно, связано с уменьшением характерной энергии размерного квантования с увеличением размера квантовой точки.

В. Влияние анизотропии размера КТ на локализацию носителей

Наличие аксиальной анизотропии размера КТ, характеризуемой параметром $\xi_s = d_x^2/d_z^2$ приводит к понижению уровня энергии размерного квантования электронов и дырок по сравнению с уровнем в сферически-симметричной КТ с усредненным диаметром d_s , определяемом условием $d_z^2/d_s^2 = (\xi_s + 2)/(3\xi_s)$ [24] в случае $\xi_s > 1$ (сплюснутые КТ) по сравнению с уровнем в сферически-симметричной КТ с диаметром $d = d_z$. На рис. 3 показано положение уровня энергии электрона в аксиально-анизотропном потенциале с $\xi_s = 2$, и видно его понижение по сравнению со сферически-симметричным потенциалом, при этом энергия локализация электрона возрастает.

Для оценки порога локализации в аксиально-анизотропных КТ с параметром ξ_s можно воспользоваться зависимостями, показанными на рис. 4 для сферически-симметричной КТ с диаметром d_s . Энергии локализации электронов и дырок, определенные для параметров $\sigma_{e,h}$, вычисленных с $d = d_s$, являются оценкой снизу. Оценку сверху можно получить, определив энергии локализации для параметров $\sigma_{e,h}$, вычисленных с $d = d_x$.

Дополнительно, понижение симметрии при аксиальной анизотропии приводит к расщеплению четырехкратно вырожденного основного уровня дырки E_h на состояния с проекцией момента на ось роста структуры $M = \pm 3/2$ (тяжелые дырки с уровнем энергии E_{hh}) и $M = \pm 1/2$ (легкие дырки с уровнем энергии E_{lh}), причем в сплюснутых КТ основным является состояние тяжелых дырок. При заданной геометрической анизотропии КТ, характеризуемой параметром $\xi_s = d_x^2/d_z^2$, относительное расщепление $\Delta_{ax}/E_h^{\text{loc}} = (E_{lh} - E_{hh})/E_h^{\text{loc}}$ тем больше, чем меньше значение параметра $\sigma_h = 1/v_{\text{off}}$ для дырок.

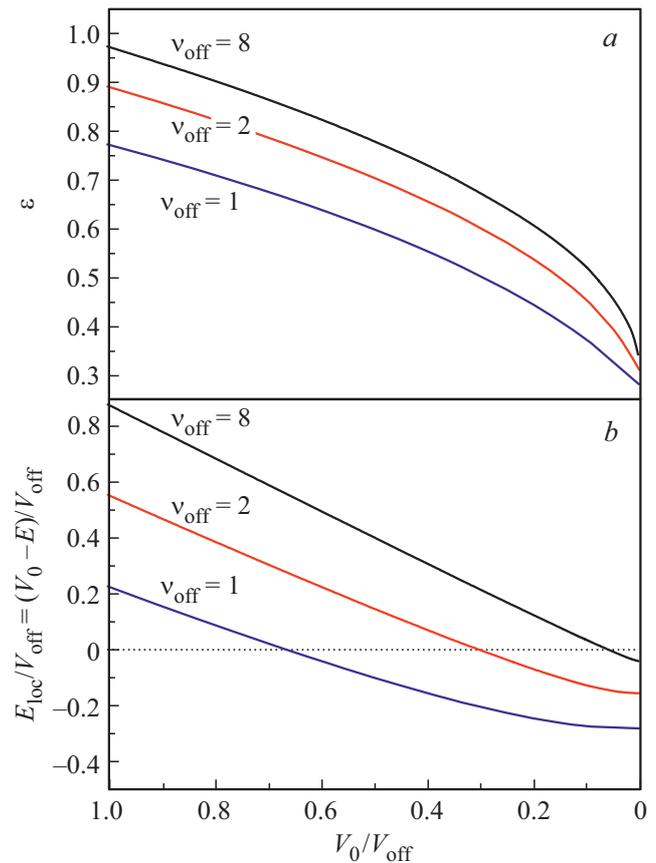


Рис. 5. Зависимость безразмерной энергии уровня электронов (a) и энергии локализации электрона в плоскости КТ (b) от параметра анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{\text{off}} = 1/\xi_p$ для трех значений безразмерного барьера вдоль оси z $v_{\text{off}} = 1, 2$ и 8 . Горизонтальная пунктирная линия соответствует порогу локализации электронов в плоскости структуры.

С. Влияние анизотропии потенциального барьера КТ на локализацию носителей

Наличие аксиальной анизотропии потенциального барьера, как и в случае аксиальной анизотропии размера КТ, приводит к понижению уровней размерного квантования электрона и дырки и снятию четырехкратного вырождения уровня дырки. При этом, как видно из рис. 3, a, понижение энергии в потенциалах с заданным значением $\xi = \xi_s \xi_p$ сопоставимо между собой. Однако в случае $\xi_p > 1$, барьер в плоскости структуры понижается и понижение уровня энергии сопровождается уменьшением энергии локализации $E_{\text{loc}} = (V_0 - E)$ в плоскости КТ. При этом, как видно из рис. 3, b, вероятность найти электрон за пределами КТ остается ничтожно малой при условии положительной энергии локализации.

На рис. 5, a показана зависимость безразмерного уровня энергии ε электронов в КТ от анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{\text{off}} = 1/\xi_p$ при сферически симметричном размере КТ ($\xi_s = 1$) и при трех значе-

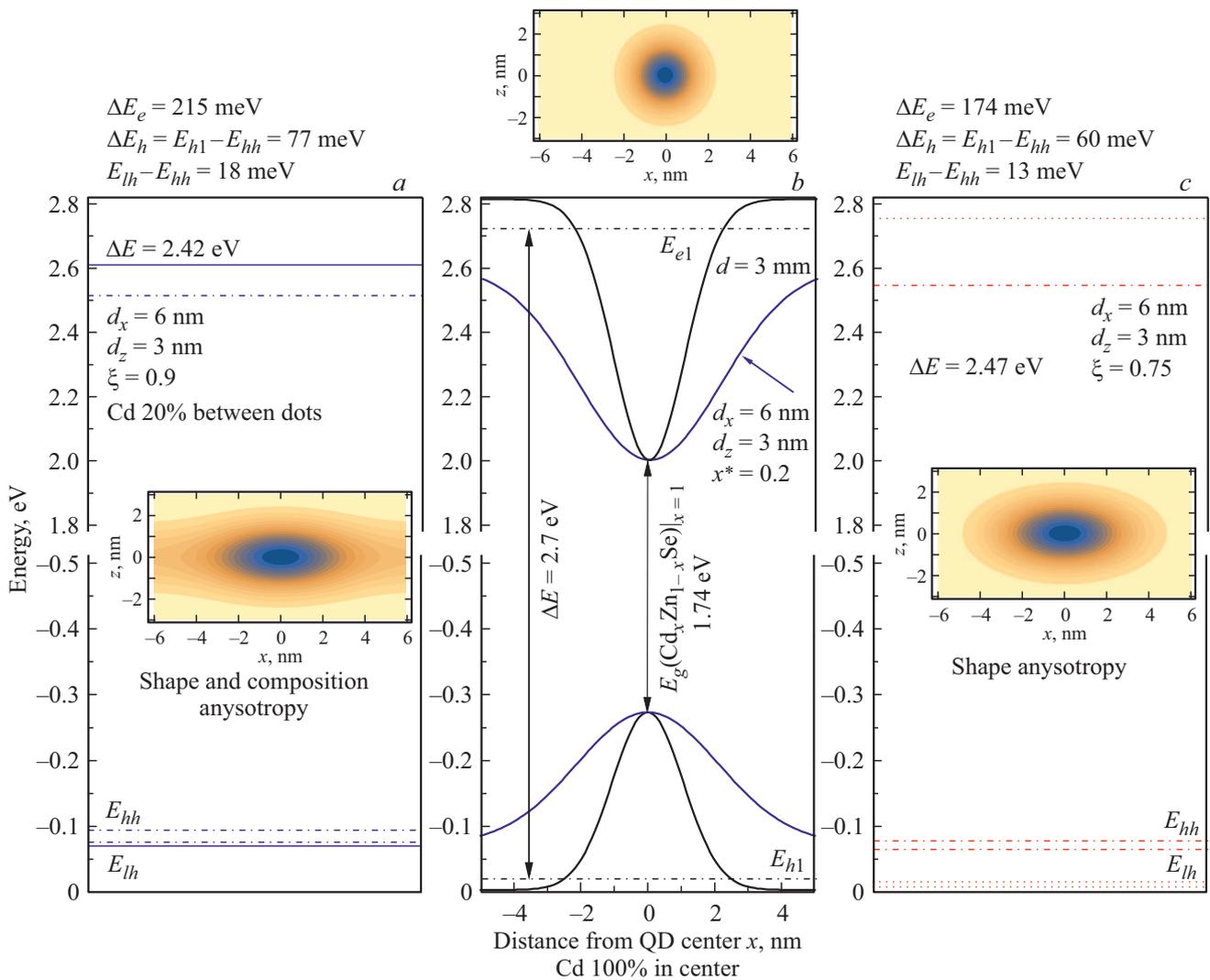


Рис. 6. Потенциальные профили электронов и дырок в сплюснутых квантовых точках $Cd_xZn_{1-x}Se/ZnSe$ для значения концентрации Cd $x = 1$ в центре КТ и фиксированного размера КТ в направлении оси z $d_z = d = 3$ nm. Горизонтальные штрихпунктирные линии показывают основные уровни энергии электронов и дырок для локализованных состояний, пунктирные линии на панели (c) — возбужденные уровни.

ниях безразмерного потенциального барьера v_{off} вдоль оси роста структуры. При исчезновении потенциального барьера в плоскости $V_0 = 0$ и $\xi_p \gg 1$, уровни энергии стремятся к энергии размерного квантования в двумерной квантовой яме с барьером V_{off} . При этом энергия локализации носителя вдоль оси z , определенная как $E_{loc}^z = (V_{off} - E)$ возрастает при фиксированном значении V_{off} , а энергия локализации носителя в плоскости $E_{loc} = (V_0 - E)$ убывает. На рис. 5, b показана зависимость энергии локализации носителей в плоскости от анизотропии потенциального барьера $V_0/V_{off} = 1/\xi_p$. Видно, что чем больше v_{off} , тем при меньших значениях v_0 возможна локализация носителя в плоскости. При $v_{off} = 1$, порог локализации в плоскости соответствует значению $v_0 \approx 0.65$ и $\sigma \approx 1.54$, в то время как при $v_{off} = 2$, порог локализации в плоскости соответствует значению $v_0 \approx 0.55$ и $\sigma \approx 1.8$, что совпадает с поро-

гом локализации, полученным ранее для сферически-симметричных КТ. При отрицательной энергии локализации вероятность обнаружить носитель между квантовыми точками в плоскости возрастает экспоненциально. Однако в области положительных, хотя и малых энергий локализации вероятность обнаружить электроны и дырки на расстоянии большим чем удвоенный эффективный радиус от центра КТ исчезающе мала.

D. Влияние анизотропии КТ на оптические свойства

Рассмотрим влияние анизотропии КТ на энергии оптических переходов в КТ на примере КТ с фиксированным размером в направлении оси z $d_z = d = 3$ nm и $x = 1$ в центре КТ. Это соответствует значениям потенциального барьера $V_{off}^c = 0.81$ eV на границе КТ и жесткости по-

тенциала в центре КТ $\kappa_c^z = 2V_{\text{off}}^e/a_z^2 = 0.72 \text{ eV/nm}$, для электронов и $V_{\text{off}}^h = 0.27 \text{ eV}$, $\kappa_h^z = 2V_{\text{off}}^h/a_z^2 = 24 \text{ eV/nm}$ для дырок. На рис. 6 показаны потенциальные профили для электронов и дырок, энергии уровней и энергия оптического перехода для сферически-симметричной КТ (панель (b)), и аксиально анизотропных КТ с $d_x = 6 \text{ nm}$ для значения концентрации Cd $x^* = 0$ (панель (c)) и 0.2 (панель (a)) между точками в плоскости. Штрихпунктирные линии — соответствуют основному состоянию электронов и дырок, пунктирные — возбужденным, если таковые имеются. На панели (a) сплошные линии соответствуют барьеру в плоскости структуры. Видно, что анизотропия размера КТ $\xi_x = d_x^2/d_z^2 = 4$ при одинаковом потенциальном барьере как вдоль оси роста, так и в плоскости структуры приводит как к уменьшению энергии оптического перехода на величину порядка 230 meV, так и к появлению локализованных возбужденных уровней электронов и дырок. Наличие локализованных возбужденных уровней позволяет резонансное оптическое возбуждение КТ. При дополнительном понижении потенциального барьера в плоскости, соответствующего $x^* = 0.2$ (панель (a)), энергия перехода понижается еще на 20 meV, однако энергия локализации для основного состояния электронов и дырок в плоскости уменьшается, а возбужденные уровни делокализуются. При дальнейшем увеличении концентрации Cd между КТ до $x^* = 0.4$ и соответствующем понижении потенциальных барьеров в плоскости, локализация основных уровней энергии как дырки, так и электрона пропадает. При небольших энергиях локализации уровней, повышение температуры может приводить к тепловому выбросу носителей из КТ в плоскость структуры что может проявляться в уширении линии фотолюминесценции.

4. Заключение

Проведено рассмотрение влияния анизотропии формы и состава КТ на пороговые значения потенциальных барьеров, ниже которых локализация носителей отсутствует. При отрицательной энергии локализации вероятность обнаружить носитель между квантовыми точками в плоскости возрастает экспоненциально. Однако в области положительных, хотя и малых энергий локализации вероятность обнаружить электроны и дырки вне КТ крайне мала. Показано, что при исчезновении потенциального барьера в плоскости роста, энергии уровней стремятся к энергиям уровней размерного квантования в квантовой яме. Более того, меняется вид системы квантовых уровней от свойственного КТ к характерному для квантовой ямы. Значения пороговых значений потенциальных барьеров могут быть рассчитаны, используя данные ПЭМ и микроанализа. Сравнение этих значений с величиной kT (T — температура, при которой должен функционировать прибор, k — постоянная Больцмана) может дать информацию о том, применим ли данный массив КТ для создания однофотонных излучателей,

работающих, к примеру, при комнатной температуре, или же он оптимален для создания желтых лазеров, где требуется дополнительный сдвиг энергии в длинноволновую область, и для которых система уровней размерного квантования, типичная для КТ, не является необходимым условием.

Список литературы

- [1] Single semiconductor quantum dots / Ed. P. Michler. Springer, Berlin (2009).
- [2] M.D. Eisaman, J. Fan, A. Migdall, S.V. Polyakov. Rev. Sci. Instruments **82**, 071101 (2011).
- [3] N. Boto, P. Kok, D.S. Abrams, S.L. Braunstein, C.P. Williams, J.P. Dowling. Phys. Rev. Lett. **85**, 2733 (2000).
- [4] V. Giovannetti, S. Lloyd, L. Maccone. Science **306**, 1330 (2004).
- [5] C. Santori, D. Fattal, J. Vuckovic, G.S. Solomon, Y. Yamamoto. Nature **419**, 594 (2002).
- [6] Y.M. He, Y. He, Y.-J. Wei, D. Wu, M. Atature, C. Schneider, S. Höfling, M. Kamp, C.-Y. Lu, J.-W. Pan. Nature Nanotech. **8** 213 (2013).
- [7] G. Sallen, A. Tribu, T. Aichele, R. Andrè, L. Besombes, C. Bougerol, S. Tatarenko, K. Kheng, J.Ph. Poizat. Phys. Rev. B **80**, 085310 (2009).
- [8] O. Fedorych, C. Kruse, A. Ruban, D. Hommel, G. Bacher, T. Kümmell. Appl. Phys. Lett. **100**, 061114 (2012).
- [9] W. Quitsch, T. Kimmell, A. Gust, C. Kruse, D. Hommel, G. Bacher. Appl. Phys. Lett. **105**, 091102 (2014).
- [10] A. A. Toropov, M.V. Rakhlin, K.G. Belyaev, S.V. Sorokin, G.V. Klimko, S.V. Gronin, I.V. Sedova, I.S. Mukhin, T.V. Shubina, S.V. Ivanov. J. Phys.: Conf. Ser. **917**, 022001 (2017).
- [11] S.V. Ivanov, A.A. Toropov, T.V. Shubina, S.V. Sorokin, A.V. Lebedev, I.V. Sedova, P.S. Kop'ev. J. Appl. Phys. **83**, 3168 (1998).
- [12] F. Gindele, U. Woggon, W. Langbein, J. M. Hvam, K. Leonardi, D. Hommel, H. Selke, Phys. Rev. B **60**, 8773 (1999).
- [13] A. Klochikhin, A. Reznitsky, B. Dal Don, H. Priller, H. Kalt, C. Klingshirn. Phys. Rev. B **69**, 085308 (2004).
- [14] M.V. Rakhlin, K.G. Belyaev, I.V. Sedova, S.V. Sorokin, S.V. Gronin, A.A. Usikova, A.A. Sitnikova, P.N. Brunkov, S.V. Ivanov, A.A. Toropov. Phys. Status Solidi C **13**, 514 (2016).
- [15] V. Türck, S. Rodt, O. Stier, R. Heitz, U.W. Pohl, R. Engelhardt, D. Bimberg. J. Lumin. **87–89**, 337 (2000).
- [16] L. Besombes, K. Kheng, L. Marsal, H. Mariette. Phys. Rev. B **63**, 155307 (2001).
- [17] M.V. Rakhlin, K.G. Belyaev, G.V. Klimko, I.S. Mukhin, D.A. Kirilenko, T.V. Shubina, S.V. Ivanov, A.A. Toropov. Sci. Rep. **8**, 5229 (2018).
- [18] N. Peranio, A. Rosenauer, D. Gerthsen, S.V. Sorokin, I.V. Sedova, S.V. Ivanov. Phys. Rev. B **61**, 16015 (2000).
- [19] D. Litvinov, A. Rosenauer, D. Gerthsen, N.N. Ledentsov. Phys. Rev. B **61**, 16819 (2000).
- [20] D. Litvinov, M. Schowalter, A. Rosenauer, B. Daniel, J. Fallert, W. Löffler, H. Kalt, M. Hetterich. Phys. Status Solidi A **205**, 2892 (2008).
- [21] С.В. Сорокин, И.В. Седова, К.Г. Беляев, М.В. Рахлин, М.А. Яговкина, А.А. Торопов, С.В. Иванов. Письма в ЖТФ **6**, 94 (2018).

- [22] T.V. Shubina, A.V. Rodina, M.A. Semina, A.A. Golovatenko, A.A. Toropov, M.V. Rakhlin, I.V. Sedova, S.V. Sorokin, S.V. Gronin, A.A. Sitnikova, D.I. Kuritsyn, S.M. Sergeev, Z.F. Krasil'nik, S.V. Ivanov. *Phys. Status Solidi B* **253**, 1485 (2016).
- [23] A.A. Golovatenko, M.A. Semina, A.V. Rodina, T.V. Shubina. *Acta Phys. Polon. A* **129**, 107 (2016).
- [24] Т.В. Шубина, К.Г. Беляев, М.А. Семина, А.В. Родина, А.А. Головатенко, А.А. Торопов, С.В. Сорокин, И.В. Седова, В.Ю. Давыдов, А.Н. Смирнов, П.С. Копьев, С.В. Иванов. *ФТТ* **58**, 2175 (2016).
- [25] M.A. Semina, A.A. Golovatenko, A.V. Rodina. *Phys. Rev. B* **93**, 045409 (2016).
- [26] А.А. Головатенко М.А. Семина, А.В. Родина, Т.В. Шубина, *ФТТ* **8**, 1499 (2018).
- [27] S. Adachi. *Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*. Chippenham. John Wiley and Sons Ltd (2009).
- [28] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [29] B.L. Gel'mont, M.I. D'yakonov. *Sov. Phys. Semicond.* **5**, 905 (1971).
- [30] A.I. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D.J. Norris, M. Bawendi. *Phys. Rev. B* **54**, 4843 (1996).

Редактор Т.Н. Василевская