

УДК 535.375

Исследование спектров люминесценции квантовых точек полупроводников (CdTe, CdSe, ZnSe), внедренных в стеклянную матрицу

08, август 2012

А.С. Завидеев

*Студент,
кафедра «Техническая физика»*

*Научный руководитель: Н.А. Задорожный,
кандидат технических наук, доцент кафедры «Техническая физика»*

МГТУ им. Н.Э. Баумана
alfastudent@gmail.com

В последнее десятилетие во всем мире и, в частности, в России, наметилась тенденция к изучению и освоению нанотехнологий. Внедрение нанотехнологий позволит значительно усовершенствовать производство многих современных устройств, а также создать новые, с недостижимыми на данный момент характеристиками.

Бурное развитие высокоточной техники и технологии, позволяющей манипулировать нанометровыми объектами, привели к тому, что стало возможным получать полупроводниковые нанокристаллы – так называемые квантовые точки. Квантовая точка – это специальным образом полученный наноразмерный объект, в силу своих малых размеров обладающий не непрерывным, а дискретным энергетическим спектром. Внутри квантовой точки обычно находится несколько электронов, которые удерживаются там электромагнитными полями. Такую конфигурацию электромагнитных полей в физике называют потенциальной ямой.

Размеры квантовой точки порядка 10^{-9} м, и по законам квантовой механики в ней начинают проявляться эффекты квантования энергетических уровней

($E = \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2}$), на которых могут находиться электроны. Это означает, что

электрон, находящийся внутри квантовой точки, может иметь не любую энергию, а только одну из набора вполне определенных значений, зависящих от конфигурации точки, ее размеров, окружения и так далее. В силу этой аналогии ученые иногда называют квантовые точки "искусственными атомами", хотя реальная квантовая точка при этом может состоять из сотен или даже нескольких тысяч атомов. Другими словами, наука занимается сегодня тончайшей инженерией, когда конструируется электронная зона кристаллов и их состояние внутри.

Характеристики квантовой точки можно менять в достаточно широких пределах, что позволяет получать структуры с нужными и весьма удивительными свойствами, аналогов которых, возможно, не существует в природе.

Рассматриваемая нами тема люминесценции светофильтров с внедренными в них квантовыми точками является одним из наиболее перспективных направлений изучения свойств квантовых точек и их применения в практике. Квантовые точки востребованы в производстве источников белого света, идентификационных меток и биомедицинских маркеров. Перспективные области применения квантовых точек — солнечные батареи с повышенным КПД преобразования, «гибкая» электроника и оптоэлектронные устройства.

Следует отметить, что этот проект важен для развития не только отечественной инновационной экономики, но и, в частности, медицины. Квантовые точки являются сырьем для целого ряда перспективных направлений наноиндустрии с высокой добавленной стоимостью, таких как производство биомаркеров и диагностической аппаратуры или оптоэлектронных устройств.

Задачей данной работы является получение спектров поглощения и люминесценции светофильтров на основе квантовых точек, исследование полученных спектров и их основных характеристик, а также попытка нахождения связи между спектрами люминесценции и некоторыми свойствами квантовых точек.

Практической важностью данного исследования являются перспективы внедрения квантовых точек в осветительные приборы и LCD-устройства, например, современные мониторы.

Оптические параметры квантовых точек (спектры поглощения и люминесценции) зависят от размеров нанокристаллов. Поэтому, меняя их размеры и химический состав, можно получить спектры излучения квантовых точек в широкой области длин волн — от ближнего ультрафиолета до ближнего ИК-диапазона. При этом квантовые точки имеют большой коэффициент поглощения в широкой полосе, что позволяет возбуждать разные нанокристаллы светом с одной и той же длиной волны. Спектр люминесценции КТ представляет собой относительно узкую полосу, положение максимума которой зависит от среднего размера КТ, а ширина определяется разбросом КТ по размерам, который достигает 5–10%. Кроме того, при высоком квантовом выходе люминесценции (до 80%) такие нанокристаллы обладают достаточно высокой химической устойчивостью и фотостабильностью.

В данной работе для получения и изучения спектров используется современное оборудование (спектрофотометр U21830), позволяющее в автоматическом режиме передавать данные на персональный компьютер для последующей их обработки специализированными математическими программами.

Для исследования спектрально-люминесцентных свойств были использованы квантовые точки CdTe, CdSe и ZnSe. В работе [1] рассмотрена модель квантовой точки как тела вращения. Предполагается, что в идеальной квантовой точке помещается один квантовый уровень. Для этого форма кластера, образующего подобную квантовую точку, должна быть компактной, такой как сфера, куб и т. п. Однако экспериментальные наблюдения массивов квантовых точек InAs на подложке GaAs показывают, что квантовые точки арсенида индия представляют собой сильно сплюснутые дискообразные кластеры, у которых в принципе может быть множество уровней. Если диск имеет достаточно большой диаметр, то он будет представлять собой фрагмент квантовой ямы, у которого зоны поперечного движения расщепляются в субструктуру уровней. В работе [1] также проводится качественное исследование множественности подобной субструктуры. С этой целью рассмотрены две модели, которые позволяют получить аналитическое решение для

энергии электрона в дискообразном объекте при параболическом законе дисперсии в InAs. Одна модель относится к кластеру, имеющему форму эллипсоида вращения (рис. 1, а). Для нее в работе развит метод построения квазисферической системы эллипсоидальных координат, которая допускает полное разделение переменных, как это имеет место в сферической системе координат. Введение ортогональной квазисферической системы справедливо, однако, лишь для достаточно большой степени сплюснутости, т. е. отношения большой оси эллипсоида к малой. Известные эллипсоидальные координаты, описанные, например, в [2], не допускают полного разделения переменных, поскольку две координаты, аналогичные радиусу и полярному углу, остаются зацепленными. Поэтому для обоснования применимости квазисферической системы при небольшой сплюснутости мы используем цилиндрическую модель квантовой точки, которая допускает точное решение. В этом случае квантовая точка представляет собой фрагмент квантовой ямы, который получается путем вырезания из квантовой ямы непроницаемой для носителей цилиндрической поверхности.

На рис. 1, б изображен такой цилиндр. Граничные условия на торце цилиндра имеют тот же вид, что и в квантовой яме, а на боковой его поверхности волновая функция считается равной нулю. Тогда в цилиндрической системе координат переменные разделяются, что приводит к простому точному решению для энергетического спектра. Это дает основание для того, чтобы отбросить одно из решений квазисферического приближения. Волновая функция такого решения постоянна по полярному углу, и такое состояние является наинизшим по энергии. Как показывает сравнение с точным решением для цилиндра, такое решение является лишним, и его не следует принимать во внимание, поскольку оно появляется вследствие неприменимости квазисферического приближения при небольшой степени сплюснутости.

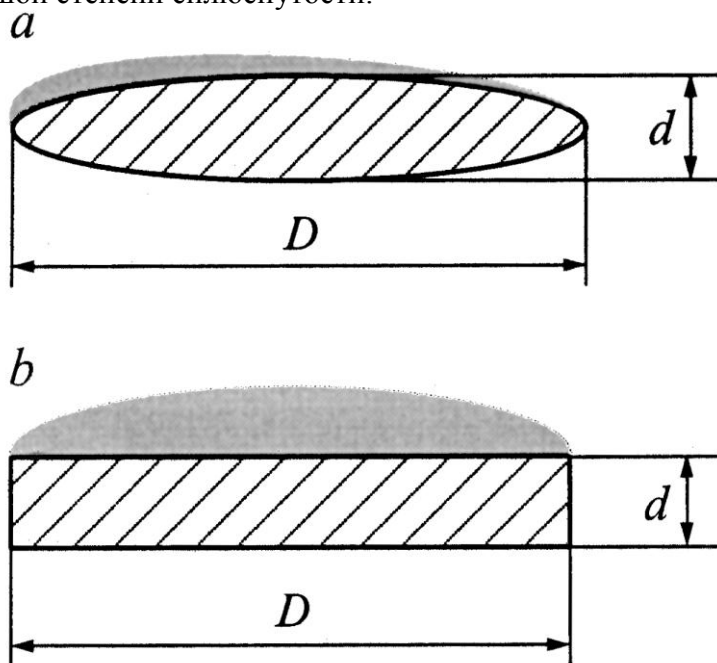


Рис. 1. Поперечные разрезы сплюснутых тел вращения с диаметром D и высотой d : а – эллипсоид; б – цилиндр (таблетка).

Аналогичный теоретический анализ энергетических уровней квантовых точек, рассматриваемых как сплюснутое тело вращения, для материалов CdTe, CdSe и ZnSe, планируется провести в дальнейшем.

В рамках выполнения исследований было проведено компьютерное моделирование процесса прохождения излучения (потока частиц) через вещество, в данном случае, через светофильтр. Светофильтры рассматривались как стеклянные матрицы с внедренными в них «искусственными атомами» – квантовыми точками.

В рамках исследований были построены одномерная, а затем и двумерная модели процесса облучения вещества потоком частиц.

В одномерной модели рассматривался процесс прохождения частиц через вещество, без учета разброса частиц по направлениям вылета, при условии их рождения в одной точке.

Распределение частиц по энергиям при рождении было принято равномерным, от 0 до E_0 . Длина свободного пробега определялась случайным образом, с учетом физической модели взаимодействия фотона с электроном. Результаты прохождения частиц через вещество, как зависимость от координаты X , представлены на рис. 2.

Вертикальная шкала графика является логарифмической, поэтому график, как и ожидалось, получился близок к прямой. Координата X измеряется в мм, а Y – это отношение количества пройденных путь X частиц ($N(X)$) к начальному числу частиц N_0 .

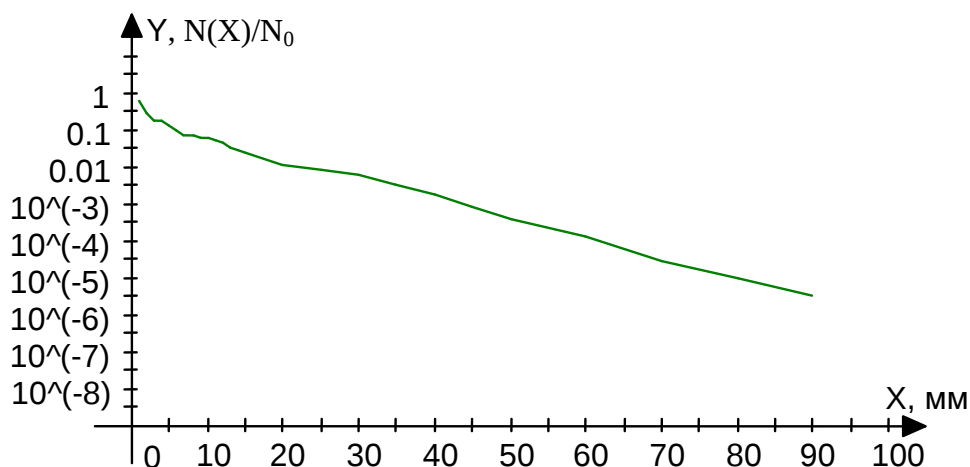


Рис. 2. График зависимости интенсивности потока фотонов от пройденного пути.

Моделирование двумерного случая строилось на базе одномерного. Графически модель численного эксперимента выглядит следующим образом (рис. 3).

Плоский источник излучения – отрезок длиной 2 мм. Фотоны вылетают с линии отрезка в нижнюю полуплоскость и могут пройти через слой стекла и слой желатиновой пленки. Слои стекла имеют толщину 1 мм, пленка – 0.1 мм. Детекторы расположены на расстоянии 2.1 мм от источника (нижняя линия на рисунке), координата x меняется в задаваемых пределах.

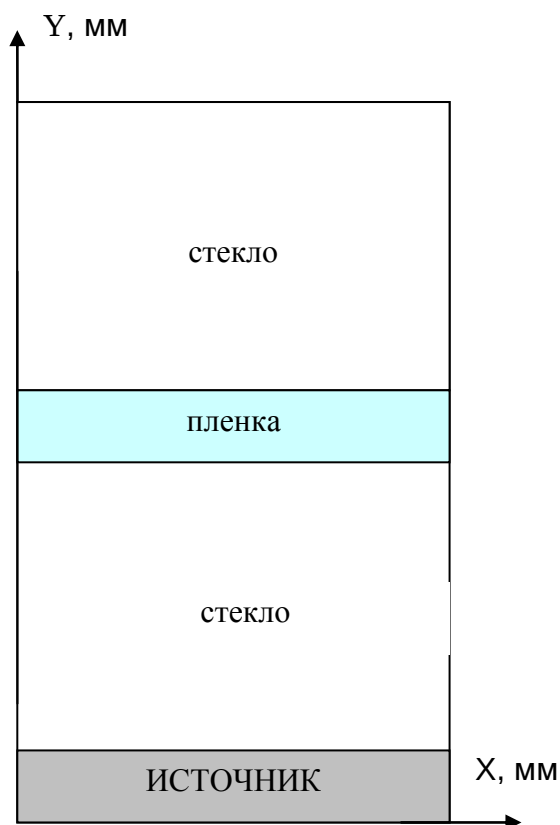


Рис. 3. Модель компьютерного эксперимента для двумерного случая.

На рис. 4 изображено распределений «первых» траекторий фотонов, то есть траекторий от вылета из источника до первого столкновения. Длина свободного пробега вычислялась в соответствии с алгоритмом метода Монте-Карло.

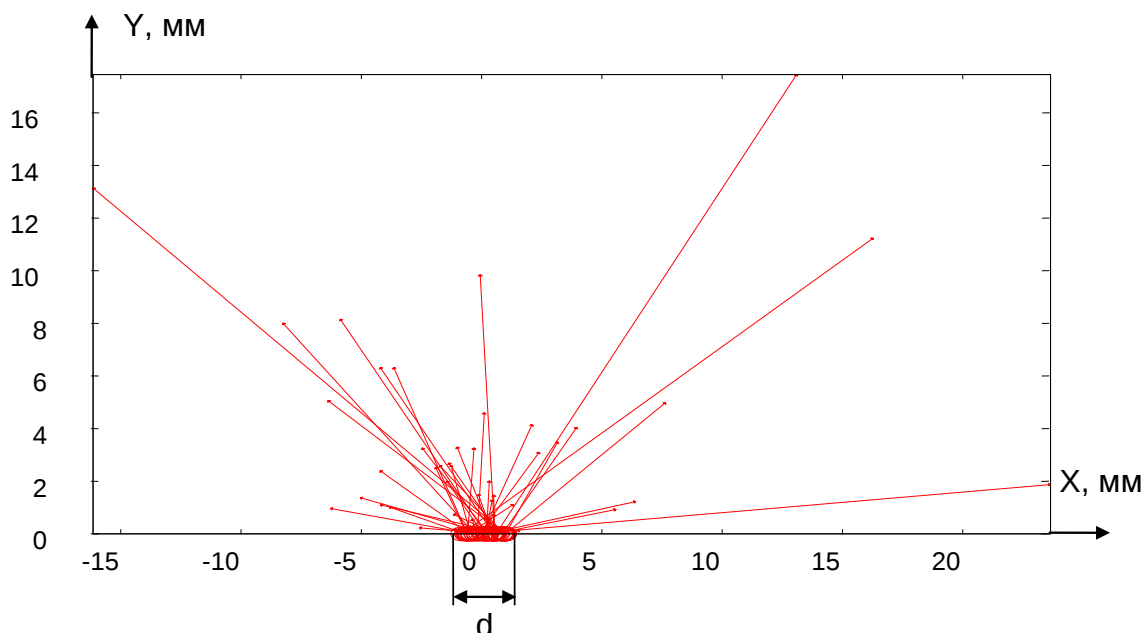


Рис. 4. Точки генерации частиц и траектории их полета до первого столкновения (d – линейный размер источника фотонов, $d = 2$ мм).

Область детектирования, расположенная на расстоянии 2.1 мм от источников, состояла, в соответствии с методом Монте-Карло, из точечных источников. Для

$N=500$ частиц было сгенерировано 4 разных случайных распределения начальных условий (координаты точки рождения и векторы направления вылета) для каждой точки. На рис. 5 указано суммарное распределение интенсивности (J) в зоне расположения детекторов.

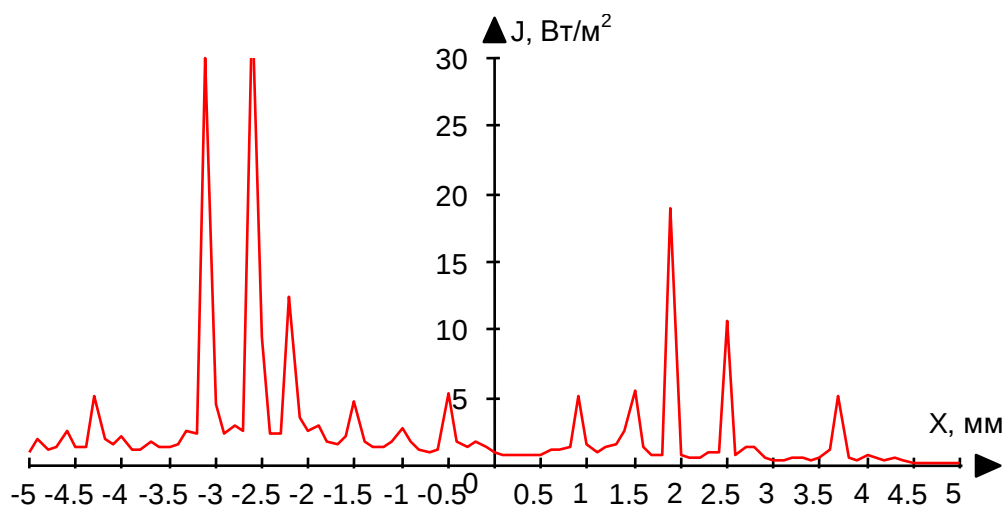


Рис. 5. Распределение интенсивности в детекторах.

Наличие пиков интенсивности, иногда в несколько раз превышающих общий фон, объясняется очень малым расстоянием между случайным положением кванта и данным точечным (!) детектором.

Развитие данной работы в части моделирования прохождения частиц через вещество предполагает усложнение модели, в частности, учет неоднородности светофильтра и сглаживание пиков интенсивности путем увеличения числа частиц и оптимизации программного кода.

Кроме этого, работа будет вестись в направлении проведения теоретических исследований квантовых точек, аналогичных работе [7].

Литература

1. Зегря Г.Г., Константинов О.В., Матвеевцев А.В. Структура энергетических квантовых уровней в квантовой точке, имеющей форму сплюснутого тела вращения. //Физика и техника полупроводников, 2003, том 37, вып. 3., С. 334 – 338.
2. Ландсберг Л.. Оптика. – ФизМатЛит, 1955. – 684 с.
3. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. — М.: Мир, 1986. — 496 с.
4. Федоров А.В., Баранов А.В. Оптика квантовых точек // В кн. Оптика наноструктур/ Под ред. Федорова А.В. - СПб.: Недра, 2005. – С. 181.
5. Адрианов В.Е. и др. Динамика спектрально-люминесцентных свойств квантовых точек CdSe/ZnS в гидрофобных растворителях. //Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики, 2009, №5(63), с. 30 – 35.
6. Максимов М.В., Журов А.Е. Квантовые точки в современной оптоэлектронике. //Лекториум Физико-Технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, 2009, С. 19 – 29.
7. Шпольский И.В. Атомная физика. Т. 1 и т. 2. Любое издание.// М.: Мир, 1946 г.

