5. Одномерные и нульмерные системы

# Моделирование спектров фотолюминесценции неоднородных массивов эпитаксиальных квантовых точек CdSe/ZnSe

**А. А. Головатенко**1, М. А. Семина1, А. В. Родина1, T. В. Шубина1

1 ФТИ им. А.Ф. Иоффе, РАН, Санкт-Петербург, 194021, Россия

тел: (812) 247-2245, факс: (812) 247-1017, эл. почта: sasha.pti@mail.ioffe.ru

Квантовые точки (КТ) CdSe/ZnSe, формируемые эпитаксиальными методами, имеют ряд принципиальных отличий по сравнению с коллоидными КТ. Концентрация Сd в этих точках максимальна в центре и плавно спадает к краям; форма точек скорее сфероидная, чем сферическая; поляризуемость полупроводниковой матрицы много выше, чем диэлектрической. И, наконец, плотность КТ в двумерном массиве, как правило, велика, т.е. нельзя пренебречь возможным взаимодействием между соседними точками. В работе проведено теоретическое рассмотрение влияния этих особенностей на спектр излучения неоднородных массивов КТ с плотностью 1011-1012 см-2 и распределением планарных размеров в диапазоне 2-12 нм с пиком на 2-4 нм, сформированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ).

На первом этапе моделирование спектров ФЛ массивов КТ проводилось путем расчета плотности состояний *I*DOS на нижнем уровне размерного квантования экситонов в предположении, что количество вовлеченных в процесс излучения уровней КТ и их энергии определяются распределением точек по размерам, полученным методом просвечивающей электронной микроскопии. Пространственные потенциалы для электронов (дырок) в КТ с градиентным изменением содержания Cd были аппроксимированы как *V*e(h)(*r*) = *V*e(h)[1-exp(-18*r*2/*d*2)], где *r* - расстояние от центра КТ, *V*e(h) - разрыв зон проводимости (валентной зоны), *d* – эффективный размер точки. Расчет энергий уровней проводился с учетом сложной структуры валентной зоны с помощью численного и вариационного методов. Кулоновское взаимодействие между носителями заряда и влияние анизотропии КТ учитывалось в рамках первого порядка теории возмущений. Рассчитанный пик плотности состояний *I*DOS для нижних экситонных уровней находится в диапазоне 2.6-2.7 эВ, что существенно выше пика экспериментальной линии ФЛ (2.4-2.5 эВ) с шириной ~50 мэВ. Такая ситуация может означать, что большая часть КТ не излучает непосредственно, однако участвует в процессе переноса энергии к излучающим состояниям.

Следующий этап моделирования проводился в предположении резонансного механизма переноса энергии от КТ малого размера к крупным излучающим точкам. Необходимое условие для этого – совпадение нижних экситонных уровней в малых КТ с возбужденными уровнями в крупных точках. Численные расчеты показали, что при диаметре КТ около 6 нм и концентрации CdSe в центральной области выше 50% в точках имеется, по крайней мере, один возбужденный уровень для электронов, отстоящий на E=100-200 мэВ, и несколько близко расположенных уровней для дырок. Модифицированная плотность состояний находилась как *I*(E)=*I*DOS(E)[1-*f*(E)]+*I*DOS(E+E)*f*(E+E), где подгоночная функция *f*(E) описывает вероятность переноса возбуждения по спектру. Моделирование в предположении резонансного переноса при E=150 мэВ позволило удовлетворительно описать экспериментальный пик ФЛ. В заключение обсуждается вклад нерезонансных каналов переноса энергии с участием фононов и рассматриваются перспективы применения исследованного резонансного механизма для спектральной селекции ограниченного числа КТ.