

Domieszki w nanostrukturach

1. lity kryształ, płytke domieszki

przyjmując zero energii na dnie (w szczycie pasma)
 równanie na funkcję obwiedni dla izotropowego pojedynczego pasma
 i słabego potencjału jonu domieszki:

$$\left[\frac{p^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\kappa r} \right] \chi(\vec{r}) = E \chi(\vec{r})$$

domieszka wodoropodobna; dno pasma = próg jonizacji (dno continuum)
 energia wiązania:

$$E_n = \frac{1}{2} \frac{m^* e^4}{\kappa^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad \chi_1(r) \propto e^{-r/a_0}$$

wodór

$m^* = 1, \kappa = 1, E_1 = -13.6 \text{ eV}$ (-1/2 w j.at.)

półprzewodnik

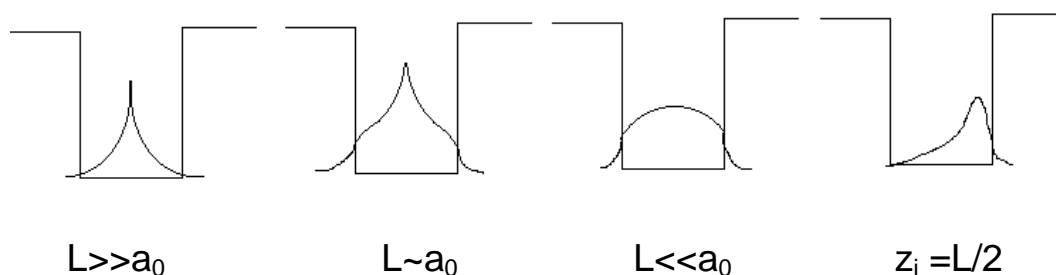
$m^* \approx 0.1, \kappa \approx 10, E_1 \approx 13.6 \text{ meV} \approx 0.014 \text{ eV}$ **płytkie**
 przerwa $\sim 1 \text{ eV}$

promień orbity Bohra (wodór $a_0 = 0.53 \text{ \AA}$):

$$a_0^* = \frac{\kappa \hbar^2}{m^* e^2} = 53 \text{ \AA}$$

2. domieszki w studniach kwantowych

L – szerokość studni Z_i - położenie domieszki, V - głębokość studni
 - schemat „kształtu” funkcji falowej ...



Przypadki graniczne

1. $L \rightarrow 0, V \rightarrow \infty =$ atom wodoru w 2D

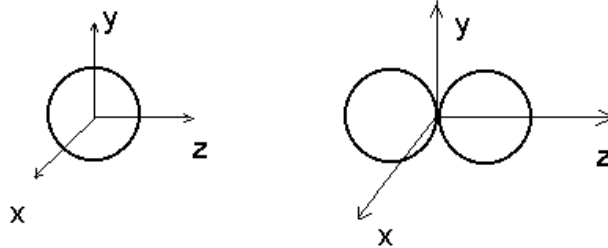
ściśle rozwiązanie (we współrzędnych biegunowych)

$$E^{2D} = 4E^{3D}$$

4 x silniej związany

2. na złączu o $V \rightarrow \infty$

gęstości radialne stanów 1s i 2p dla swobodnego atomu

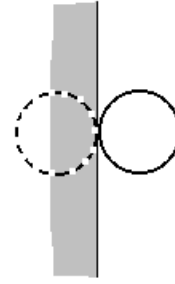


atom H w stanie 1s
daleko od nieprzenikalnej
ściany

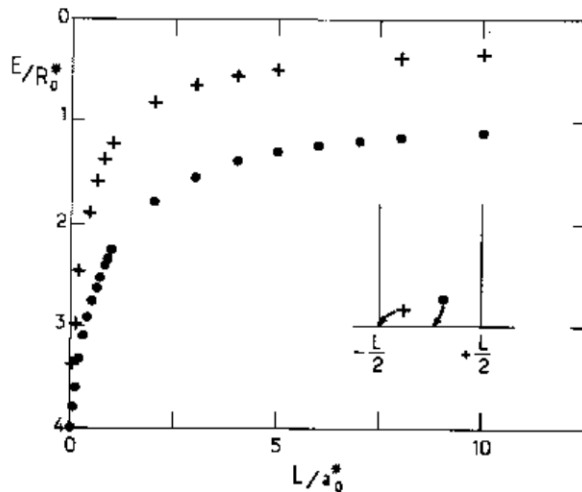
1S



blisko
nieprzenikalnej
ściany



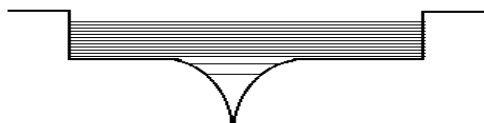
„przyklejony”
do powierzchni
ściany
2P_z
 $E(2p)=E(1s)/4$



Energia wiązania (w efektywnych rydbergach) donora w studni kwantowej o nieskończonych barierach i szerokości L (w j.at.)
 „Rzeczywiste” **studnie o skończonych barierach**

Przypadki graniczne

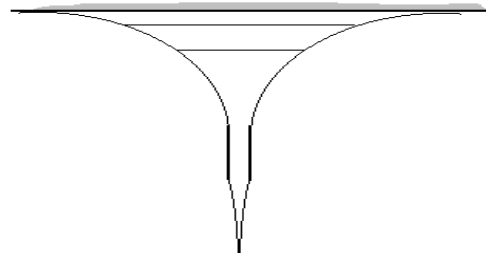
1. $L \gg a$



**potencjał studni kulomb. –
 małym zaburzeniem**

domieszka w materiale studni

2. $L \ll a$



**potencjał bariery -
 małym zaburzeniem**

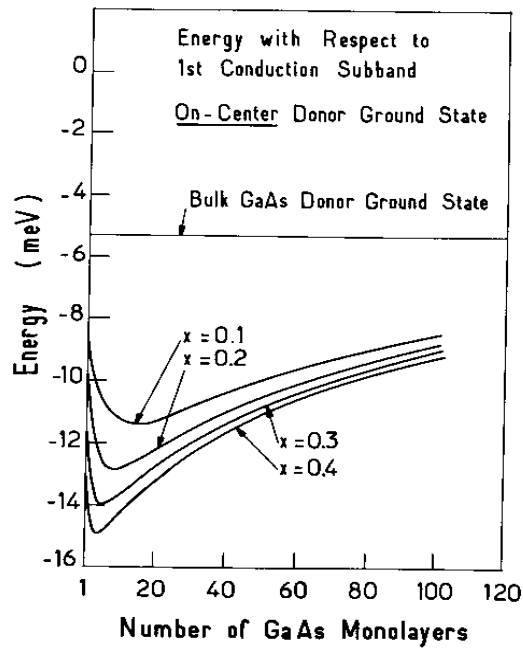
**domieszka praktycznie
 w materiale bariery
 (efektywnie)**

różnica w m^* i κ

na ogół mamy do czynienia z przypadkami pośrednimi

Def. energia wiązania

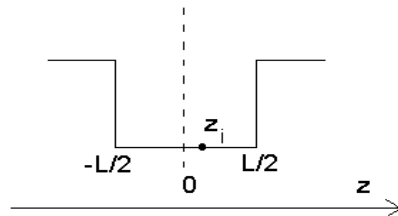
Energia względem dna najniższego podpasma



Energia wiązania donora w studni GaAlAs | GaAs | GaAlAs w funkcji szerokości studni (w liczbach monowarstw); $V_b = 0.3 \text{ eV}$

- podobnie dla akceptorów

TEORIA



$$H = \frac{p_z^2}{2m^*} + \frac{p_y^2 + p_x^2}{2m^*} + V_0 \Theta(z_2 - \frac{L^2}{4}) - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}$$

$$H = T + V_{stud} + V_{kul} = H_0 + V_{kul} = \tilde{H}_0 + V_{stud}$$

$$\Theta \{ =1 \text{ dla } |z| > L/2; =0 \text{ dla } |z| < L/2 \}$$

- Potencjał donora małym zaburzeniem
(w przybliżeniu jednego pasma)

$$H_0 \Phi_{n,k_t}(\vec{r}) = \left(E_n + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m^*} \right) \Phi_{n,k_t}(\vec{r})$$

$$\Phi_{n,k_t}(\vec{r}) = \chi_n(z) e^{ik_t \rho}$$

funkcje własne H można rozwinąć w bazie Φ

$$\Psi = \sum_{n,k_t} c(n,k_t) \Phi_{n,k_t}$$

w sytuacji kwazi-2D (z wysoką barierą)
(dobrze separowalne podpasma lub tylko jedno podpasmo obecne)

$$c(n,k_t) = c(o,k_t) \delta_{n,o}$$

najprostsze przybliżenie: **rozdzielenie zmiennych:**

$$\Psi(\vec{r}) = \chi_0(z) \phi(\rho)$$

gdzie

$$\phi(\rho) = \sum_{k_t} c(o,k_t) e^{ik_t \rho}$$

wstawiając do H, mnożąc z lewej strony przez χ i całkując po Z

$$\left[\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + V_{eff}(\rho) \right] \phi(\rho) = (E - E_0) \phi(\rho) \quad (*)$$

E_0 - energia dna zerowego podpasma, a

$$V_{ef}(\rho) = \frac{-e^2}{\kappa} \int \chi_0^2(z) \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}} dz$$

równanie (*) można rozwiązać wariacyjnie

$$\phi(\rho) = \frac{1}{\lambda} \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{(-\rho/\lambda)}$$

ponieważ w płaszczyźnie studni potencjał donora zostaje “nienaruszony” funkcję próbną met. war. można wybrać jak funkcję 1s w 2D

λ - parametr wariacyjny

energii stanu podstawowego znajduje się minimalizując funkcjonal energii z równania (*)

przybliżenie to zawodzi dla $L \rightarrow \infty$ i dla $L \rightarrow 0$

inne przybliżenia

1.

$$\Psi(\vec{r}) = N \chi_0(z) \exp\left[\frac{-1}{\lambda} \sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}\right]$$

2. funkcje zależne od ρ oraz od z można wyrazić w bazie znanych funkcji np. gaussowskich – liniowe parametry wariacyjne – diagonalizacja macierzy hamiltonianu

Domieszki w kropkach kwantowych (nanokryształach)

(jednopasmowy) model sferycznej studni potencjału

- separacja zmiennych kątowych i radialnych --> (jeśli domieszka w centrum kropki) tylko radialne równanie Schroedingera
- rozwiązaniami są “pozszywane” sferyczne funkcje Bessla i funkcje Hankl’a (w barierze)
- przybliżone rozwiązania w dowolnej sferycznej bazie
- potencjał studni znosi degenerację przypadkową (I)

- **brak podpasm dla energii wewnątrz studni**
- inna definicja energii wiązania
- dla bardzo małych kropek elektron "zlokalizowany" w obszarze bariery

EKSCYTONY

1. lity kryształ

traktując elektron (o energii z dna pasma CB) i dziurę (o energii ze szczytu pasma VB) jako kwaziswobodne cząstki o masach efektywnych m_e i m_h poruszające się w ośrodku o stałej dielektrycznej k i mogące kulombowsko oddziaływać

(E1)

$$\left[\frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{k |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right] \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = (E - E_g) \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$$

UWAGA:

energia wzbudzenia z VB do CB jest mniejsza niż szerokość przerwy energetycznej, która jest liczona w oparciu o przybliżenie jednoelektronowe;
energia „wieloelektronowego” stanu podstawowego odpowiada sytuacji gdy wszystkie jednoelektronowe stany VB są obsadzone (ale między elektronami występuje oddziaływanie kulombowskie);

gdyby energię pierwszego „wieloelektronowego” stanu wzbudzonego obliczyć „ściśle” – czyli uwzględniając efekty korelacji elektronowej do pierwszego „wieloelektronowego” stanu wzbudzonego, to byłaby ona mniejsza niż energia przerwy;
ta różnica - to energia wiązania;

w przybliżeniu jednoelektronowym „kreujemy” w VB dziurę o masie m_h^* i elektron w CB o masie m_e^* - jako „kwazicząski” mogą one oddziaływać w ośrodku o st.diel. k

podobnie jak dla atomu wodoru możemy przejść w (E1) do układu środka masy

m^* - masa zredukowana

energia wiązania w stanie podstawowym i promień Bohra

$$E_o = \frac{m^* e^4}{2k^2 \hbar^2}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2 k}{m^* e^2}$$

$m^* < m_e$, $k \sim 10$ to $a - 100$ x większe niż w atomie wodoru
energia nawet 1000 x mniejsza;

2. ekscytony w studniach kwantowych

(wyidealizowany przypadek pojedynczo-pasmowy)

(E2)

$$H = \left[\frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_h^2}{2m_h} - \frac{e^2}{k |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + V_e(z_e) + V_h(z_h) \right]$$

dochodzą niesferyczne potencjały studni

dla studni kwantowych I-rodzaju wygodnie jest przedstawić H w innych zmiennych, żeby odseparować swobodny ruch środka masy w płaszczyźnie studni.

energie wiązania ekscytonów zachowują się w funkcji szerokości studni podobnie jak energie wiązania donorów

3. ekscytony w kropkach kwantowych

dla sferycznych nanokryształów V_e , V_h , mają sferyczną symetrię

- jeśli traktować kulombowskie oddziaływanie jako zaburzenie, to w I rzędzie rachunku zaburzeń poprawka do energii

$$\Delta E = \left\langle \chi_e \chi_h \left| \frac{e^2}{kr_{eh}} \right| \chi_e \chi_h \right\rangle$$

(gdyż w E2 funkcje własne H_0 będą iloczynami f.elektronu i f.dziury)

jeśli R to promień kropki (rozmiar)

- energia kinetyczna układu skaluje się jak $\sim 1/R^2$
- energia kulombowska skaluje się jak $\sim 1/R$

dla bardzo małych kropek kwantowych,
(tzn. gdy rozmiary przestrzennego ograniczenia \ll promienia
ekscytonu)

energia wiązania ekscytonu \ll odległości pomiędzy
dyskretnymi poziomami