

INSTYTUT FIZYKI  
POLITECHNIKA WROCŁAWSKA

Praca doktorska

WŁASNOŚCI OPTYCZNE  
KROPEK KWANTOWYCH  
DRUGIEGO RODZAJU

Marcin Tytus

Promotor: prof. dr hab. inż. Lucjan Jacak

Wrocław, 2011



# Spis treści

Wstęp	7
<b>1 Kropki kwantowe</b>	<b>11</b>
1.1 Wytwarzanie kropek kwantowych . . . . .	11
1.2 Podział kropek kwantowych . . . . .	14
1.3 Ekscytony w kropkach kwantowych . . . . .	15
1.4 Modelowe potencjały kropek kwantowych . . . . .	17
1.5 Stany związane w strukturach niskowymiarowych . . . . .	21
<b>2 Własności optyczne nanostruktur półprzewodnikowych</b>	<b>23</b>
2.1 Oddziaływanie nośników ładunku z polem elektromagnetycznym	23
2.2 Przejścia międzypasmowe . . . . .	25
2.3 Przejścia wewnątrzpasmowe . . . . .	26
<b>3 Opis ekscytonu w kropce kwantowej</b>	<b>27</b>
3.1 Metoda masy efektywnej . . . . .	27
3.2 Przybliżenie pola samouzgodnionego . . . . .	29
3.3 Przybliżenie Hartree . . . . .	29
<b>4 Metody numeryczne rozwiązywania układu równań Hartree</b>	<b>33</b>
4.1 Sprowadzenie równań Hartree do postaci bezwymiarowej . . . . .	34
4.2 Dyskretyzacja równań Hartree . . . . .	35
4.3 Wyznaczanie wartości własnych . . . . .	37
4.4 Wyznaczanie wektorów własnych . . . . .	38
4.5 Numeryczne obliczanie całki Hartree . . . . .	40
4.6 Uwagi do procedury obliczeniowej . . . . .	42
<b>5 Stany ekscytonowe w kropkach kwantowych drugiego rodzaju</b>	<b>43</b>
5.1 Przybliżone liczby kwantowe . . . . .	43
5.2 Ekscyton w gaussowskiej kropce kwantowej . . . . .	44

5.3	Ekscyton w prostokątnej kropce kwantowej . . . . .	47
5.4	Przejścia międzypasmowe i wewnątrzpasmowe — dyskusja . . .	52
5.5	Podsumowanie . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Ekscyton w kropce kwantowej drugiego rodzaju w polu ma-</b>	
	<b>gnetycznym</b> . . . . .	<b>59</b>
6.1	Naładowana cząstka w polu magnetycznym . . . . .	59
6.2	Opis metodą Hartree ekscytonu w polu magnetycznym . . . . .	62
6.3	Oscylacje Aharonova-Bohma . . . . .	63
6.4	Wyniki doświadczalne . . . . .	64
6.5	Rezultaty teoretyczne . . . . .	65
6.6	Dyskusja i porównanie wyników . . . . .	69
6.7	Podsumowanie . . . . .	72
<b>7</b>	<b>Ekscyton w kropce kwantowej drugiego rodzaju w bocznym</b>	
	<b>polu elektrycznym</b> . . . . .	<b>73</b>
7.1	Stałe pole elektryczne . . . . .	74
7.2	Opis i rachunki Hartree . . . . .	75
7.3	Energia ekscytonu . . . . .	84
7.4	Tunelowanie . . . . .	85
7.5	Indukowany moment dipolowy . . . . .	87
7.6	Podsumowanie . . . . .	88
<b>8</b>	<b>Ekscyton związany przez zjonizowany donor oddalony od</b>	
	<b>studni kwantowej</b> . . . . .	<b>89</b>
8.1	Analogia do kropek kwantowych drugiego rodzaju . . . . .	89
8.2	Istnienie stanów związanych na zjonizowanym donorze . . . . .	90
8.3	Model i metoda . . . . .	91
8.4	Rezultaty i dyskusja . . . . .	93
8.5	Podsumowanie . . . . .	100
	<b>Podsumowanie</b> . . . . .	<b>101</b>
<b>A</b>	<b>Całka Hartree</b> . . . . .	<b>105</b>
<b>B</b>	<b>Wyznaczanie parametrów wariacyjnych</b> . . . . .	<b>107</b>
B.1	Energia elektronu . . . . .	107
B.2	Energia dziury . . . . .	109
<b>C</b>	<b>Publikacje</b> . . . . .	<b>115</b>
	<b>Bibliografia</b> . . . . .	<b>117</b>

*Serdecznie dziękuję Profesorowi Lucjanowi Jacakowi  
za opiekę oraz pomoc w trakcie studiów doktoranckich.*

*Dziękuję również Eli za wsparcie i cierpliwość.*



# Wstęp

W ostatnich dekadach postęp w technologii półprzewodnikowej umożliwił produkcję bardzo małych urządzeń, w których ruch nośników ładunku (najczęściej są to elektrony) ograniczony jest do dwóch lub jednego wymiaru, bądź też nośniki te zostają uwięzione w strukturach kwazierowymiarowych tzw. *kropkach kwantowych* [1, 2, 3, 4, 5, 6].

Ograniczenie ruchu nośników we wszystkich trzech wymiarach przestrzennych powoduje, że kropki kwantowe swoimi własnościami przypominają atomy. Stąd też ich druga, wymiennie stosowana, nazwa *sztuczne atomy* (ang. *artificial atoms*).

Kropka kwantowa, podobnie jak atom, a w przeciwieństwie do litego półprzewodnika, charakteryzuje się dyskretną strukturą poziomów energetycznych. Struktura ta staje się możliwa do zaobserwowania, w widmie absorpcji i emisji, jeśli tylko temperatura jest odpowiednio niska, tak, że energia  $k_B T$ , gdzie  $k_B$  jest stałą Boltzmana, jest mniejsza od różnicy poziomów energetycznych w kropce.

Różnica pomiędzy poziomami energetycznymi podyktowana jest skalą układu i, w przeciwieństwie do naturalnych atomów, w sztucznych atomach może być regulowana poprzez wybór rozmiaru kropki oraz jej kształtu.

Dla atomów, których rozmiary są rzędu  $d \sim 0,1$  nm, energia kinetyczna jest rzędu  $\Delta E \geq (\Delta p)^2 / (2m^*) \simeq \hbar^2 / (2m^* d) \simeq 10$  eV natomiast dla obiektów o rozmiarach  $d \sim 10$  nm energia  $\Delta E \simeq 10$  meV co lokuje ją w dalekiej podczerwieni<sup>1</sup>. Tak niska energia umożliwia sterowanie za pomocą zewnętrznych pól elektrycznych i magnetycznych o natężeniach nie przekraczających technicznych możliwości współczesnych urządzeń. Dodatkowo kropki kwantowe same mogą być utworzone za pomocą ogniskowania pola elektrycznego w studni kwantowej (podrozdział 1.1). Pozwala to na włączanie i wyłączanie kropek, a także ich modyfikacje i sterowanie ich rozmiarem w czasie rzeczywistym.

Wszystko to, a także szeroka gama technik pozwalających na produkcję kropek kwantowych, powoduje że są one niezwykle obiecującymi obiektami

---

<sup>1</sup>Ang. *Far-Infrared*, FIR.

badań, a także przedmiotem wielu zastosowań w dynamicznie rozwijających się dziedzinach nanotechnologii i optoelektroniki (m.in. lasery na kropkach kwantowych [7, 8, 9, 10, 11], pamięci optyczne [12], ogniwa słoneczne [13], czy też jednofotonowe źródła/detektory [14, 15, 16, 17, 18]).

Analogia pomiędzy kropkami kwantowymi i atomami pozwala na zastosowanie do opisu kropek kwantowych metod i narzędzi fizyki atomowej. Jedną z nich jest metoda Hartree, która zostanie przedstawiona w dalszej części rozprawy.

Istnieją jednak pewne cechy charakterystyczne odróżniające sztuczne atomy od ich naturalnych odpowiedników. Pierwszą z nich jest różnica w kształcie potencjału. W kropce kwantowej najczęściej nie jest on centralny jak w atomie (przyciąganie kulombowskie), a ponadto potencjał kropki nie posiada osobliwości. Ta ostatnia cecha pozwala na przybliżenie go potencjałem parabolicznym (dla dostatecznie dużych kropek). Kiedy jednak kropka staje się niewielka potencjał paraboliczny staje się nieodpowiedni i bardziej realistyczny model jest niezbędny. Kolejna z różnic powiązana jest z faktem, że nośniki ładunku w kropkach kwantowych opisujemy w przybliżeniu masy efektywnej. Prowadzi to do zwiększenia efektów związanych z polem magnetycznym i oddziaływaniem kulombowskim. Ponadto w kropkach kwantowych mogą się znajdować wraz z elektronami dziury tworząc ekscytony.

Przedmiotem niniejszej rozprawy jest właśnie dyskusja własności optycznych kropek kwantowych drugiego rodzaju związanych z możliwością wiązania przez te struktury ekscytonów. W naszych rozważaniach skupimy się przede wszystkim na wpływie rozmiaru kropki, prostopadłego do płaszczyzny kropki pola magnetycznego, a także bocznego pola elektrycznego na stany związane ekscytonu w gaussowskiej i prostokątnej kropce kwantowej drugiego rodzaju. Przedyskutujemy wpływ wymienionych czynników na energie ekscytonu, a także konsekwencje jakie dla widma fotoluminescencji może mieć umieszczenie kropki kwantowej w jednym z wymienionych pól.

Rozprawa jest zorganizowana w następujący sposób. W rozdziale 1 przedstawiamy metody wytwarzania kropek kwantowych i dwuwymiarowe potencjały modelowe wykorzystywane przy badaniu tych układów. Dodatkowo wprowadzamy podział na kropki pierwszego i drugiego rodzaju, a także dyskutujemy możliwość istnienia stanów związanych w strukturach dwuwymiarowych. Rozdział 2 zawiera ogólny opis własności optycznych nanostruktur półprzewodnikowych, których szczególnym przypadkiem są kropki kwantowe. W rozdziale 3 podajemy opis ekscytonu w kropce kwantowej metodą masy efektywnej w przybliżeniu Hartree, żeby w rozdziale 4 przejść do zaprezentowania metod numerycznych służących do rozwiązywania sformułowanego zagadnienia. Wprowadzone metody są uniwersalne i mogą posłużyć do rozwiązywania zagadnień dwuwymiarowych w każdym symetrycznym po-



tencjale. Rozdział 5 zawiera opis stanów ekscytonowych w gaussowskiej oraz w prostokątnej kropce drugiego rodzaju, a także dyskusję związanych z nimi własności optycznych tych nanostruktur w odniesieniu do kropek pierwszego rodzaju. W kolejnym rozdziale, rozdziale 6, przeanalizujemy wpływ prostopadłego do płaszczyzny kropki pola magnetycznego na ekscyton związany na kropce drugiego rodzaju. Opisane w nim oscylacje Aharonova-Bohma (i związane z nimi własności optyczne) są cechą charakterystyczną wyłącznie struktur drugiego rodzaju. Rozdział 7 zawiera opis ekscytonu w kropce kwantowej drugiego rodzaju w bocznym polu elektrycznym. Energie i funkcje falowe ekscytonu są w tym przypadku wyliczane przy użyciu metod wariacyjnych, (z uwagi na fakt, że boczne pole elektryczne łamie symetrię osiową układu). Oprócz energii ekscytonu i związanych z nią własności optycznych dysktowane są również tunelowanie dziury z kropki, a także moment dipolowy ekscytonu indukowany przyłożonym polem.

Tematem ostatniego rozdziału jest ekscyton zlokalizowany przez zjonizowany donor oddalony od studni kwantowej. Potencjał zjonizowanego donora oddalonego od studni kwantowej przypomina potencjał kropki drugiego rodzaju — jest przyciągający dla nośników ładunku tylko jednego rodzaju a ponadto jest pozbawiony osobliwości. Interesującą kwestią może więc być rozróżnianie pomiędzy kropkami kwantowymi drugiego rodzaju, a oddalonym od studni kwantowej zjonizowanym donorem.



# Rozdział 1

## Kropki kwantowe

### 1.1 Wytwarzanie kropek kwantowych

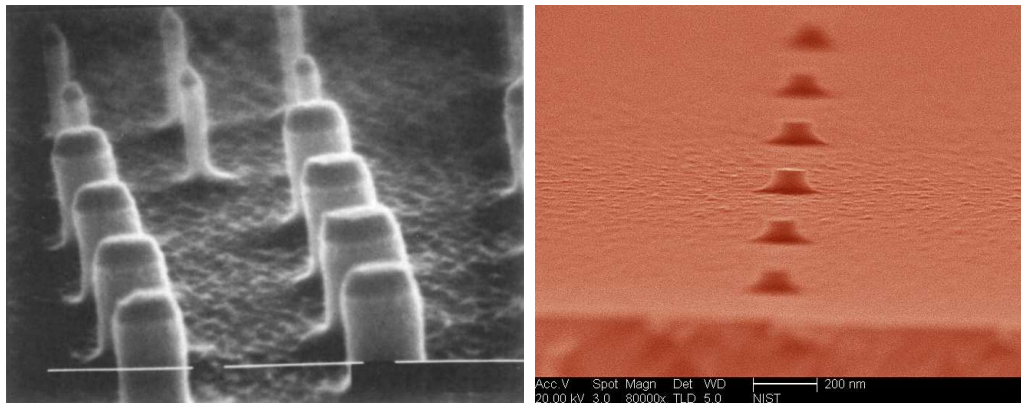
Jedną z najpopularniejszych metod wytwarzania kropek kwantowych jest obecnie metoda Stranskiego-Krastanowa [19, 20, 21, 22]. W metodzie tej na półprzewodnik podłoża nanoszony jest, za pomocą technik takich jak np. MBE<sup>1</sup>, lub MOCVD<sup>2</sup>, półprzewodnik o innej stałej sieciowej. Tworzy on *warstwy epitaksjalne* (ang. *epitaxial layer*), czyli warstwy o stałej sieciowej takiej jak warstwa podłoża, tylko do pewnej krytycznej grubości. Po przekroczeniu tej krytycznej grubości, w wyniku występujących naprężeń, na cienkiej warstwie nanoszonego półprzewodnika (ang. *wetting layer*) formują się, rozmieszczone nieregularnie, wyspy. Taką niejednorodną warstwę pokrywa się następnie warstwą materiału podłoża i uzyskuje studnie kwantową o zwiększonej grubości w obszarach wysp. W przypadku InAs i GaAs, często stosowanej pary związków półprzewodnikowych, różnica stałych sieciowych wynosi około 7%, a grubość krytyczna wynosi około 1,7 monowarstwy.

Kropki kwantowe wytworzone opisaną powyżej metodą nazywa się *kropkami samorosnącymi* (ang. *self-assembled dots*). Kształt i rozmiary kropek samorosnących zależą głównie od niedopasowania stałych sieciowych (a co za tym idzie naprężeń występujących w naniesionych warstwach), szybkości wzrostu oraz temperatury, w jakiej następuje wzrost. Kropki wytworzone z Ga(In)As na podłożu z GaAs przybierają kształt obciętych piramid lub soczewek. Te o kształcie soczewek, często modelowane za pomocą ściętego stożka, w którym stosunek wysokości do średnicy nie przekracza wartości 0,15, są bardzo płaskimi strukturami, co ma znaczący wpływ na ich właści-

---

<sup>1</sup>Ang. *Molecular Beam Epitaxy* — epitaksja z wiązek molekularnych.

<sup>2</sup>Ang. *Metal Organic Chemical Vapor Deposition* — osadzanie z par chemicznych związków metaloorganicznych.

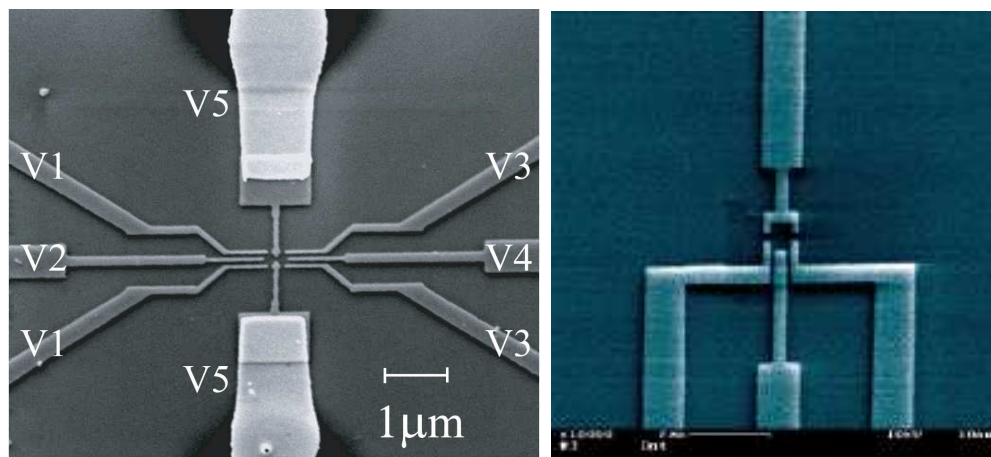


Rysunek 1.1: Po lewej: Pionowe kropki kwantowe GaAs. Rozmiar słupków w poziomie to około  $0.5 \mu\text{m}$  (za [27]). Po prawej: Kolorowa mikrografia kropek kwantowych wytworzonych za pomocą elektronolitografii i wytrawiania. Ten typ kropki kwantowej może być ukształtowany i umiejscowiony znacznie precyzyjniej niż kropki wytworzone metodami wzrostu kryształów. (za: Verma/NIST).

wości optyczne. Popularność metody Straskiego-Krastanowa wynika z faktu, że kropki kwantowe wytworzone tą metodą cechują się bardzo dobrymi właściwościami strukturalnymi oraz optycznymi.

Kolejną metodą wytwarzania kropek kwantowych, zrealizowaną najwcześniej [23], jest wytrawianie [1, 24]. Przygotowana do wytrawiania próbka składa się z cienkiej warstwy półprzewodnika umieszczonej pomiędzy dwoma warstwami innego półprzewodnika, przy czym półprzewodniki dobrane są tak, aby powstała studnia potencjału w środkowej warstwie (przykładem takiej struktury jest np. cienka warstwa GaAs obłożona warstwami AlGaAs). W pierwszym kroku powierzchnię tak przygotowanej próbki, pokrywa się cienką warstwą polimeru. Następnie naświetla się wiązką elektronową lub jonową wzór tworzonej nanostruktury i w naświetlonych miejscach maska z polimeru jest usuwana. W kolejnym kroku całą powierzchnię próbki pokrywa się warstwą metalu, po czym, w procesie wytrawiania (polimeru), usuwa się ją tam, gdzie pokrywa ona polimer. Pozostałe wysepki metalu, o pożądanym kształcie, służą jako maska przy głębokim trawieniu (ang. *deep etching*), które sięga poniżej obszaru studni kwantowej. W opisanym procesie wytworzone zostają słupki zawierające wycięte fragmenty studni kwantowej. Te tzw. „pionowe” lub „podłużne” kropki kwantowe (ang. *vertical quantum dots* zostały zilustrowane na rysunku 1.1.

Kropki kwantowe mogą również tworzyć się spontanicznie w cienkiej warstwie studni kwantowej [25, 26]. Za przykład może tu posłużyć opisana już



Rysunek 1.2: Poprzeczne kropki kwantowe. Po lewej: Podwójna kropka kwantowa otrzymana metodą elektronolitografii na podłożu z arsenku galu. Każda z kropek mierzy około 180 nm (za: Albert Chang, Duke University Department of Physics) Po prawej: Mikrografia (REM) kropki kwantowej zadawanej polem elektrycznym. Obszar kropki wytworzonej metodami litograficznymi to około  $0,5 \times 0,5 \mu\text{m}^2$  (za: <http://www.nano.physik.uni-muenchen.de>).

struktura GaAs/AlGaAs. Studnia kwantowa z GaAs nie zawsze jest jednolitej grubości — często wykazuje skoki o wysokości jednej warstwy atomowej. Jeśli taki skok charakteryzuje się rozmiarem poprzecznym rzędu 100 nm, formuje się „naturalna” kropka kwantowa<sup>3</sup>.

Następną szeroko rozpowszechnioną metodą wytwarzania kropek kwantowych jest nanoszenie elektrod ponad powierzchnią studni kwantowej [28, 29, 30, 31, 32, 33] (np. na uprzednio opisaną strukturę GaAs/AlGaAs) za pomocą technik litograficznych. Po doprowadzeniu napięcia do tak wytworzonych elektrod, niejednorodne pole elektryczne lokalizuje nośniki ładunku w małym obszarze studni.

Wytworzone tą metodą kropki to tzw. „poprzeczne kropki kwantowe” (ang. *lateral quantum dots*). Fotografie takich kropek przedstawia rysunek 1.2

Jedną z technik stosowanych przy wytwarzaniu takich elektrod jest laserowa litografia interferencyjna<sup>4</sup>, która pozwala na tworzenie odtwarzalnych, periodycznych struktur, których wzór powtarza się co 100 nm [24]. Jej zaletą jest możliwość wytwarzania matryc kropek kwantowych o powierzchni kilku milimetrów kwadratowych, doskonale nadających się do optycznych ekspe-

<sup>3</sup>Ang. *Interface Fluctuation Quantum Dot*, IFQD.

<sup>4</sup>Ang. *Laser-Interference Lithography*, LIL.

rymentów. Elektronolitografia<sup>5</sup> natomiast, umożliwia wytwarzanie specjalnie zaprojektowanych, często pojedynczych, bramek w rozdzielczości sięgającej kilkudziesięciu nanometrów, dzięki którym ruch elektronów może być kontrolowany (w gazie elektronowym poniżej elektrod) w obszarach o rozmiarach tego rzędu [34].

Możliwe jest również wytworzenie kropek w materiale studni za pomocą dyfuzji międzywarstwowej wzbudzonej wiązką lasera (ang. *laser-induced local interdiffusion*). W metodzie tej [35, 36, 37] na opisaną uprzednio strukturę GaAs/AlGaAs nałożono dodatkowo warstwę GaAs o grubości 10 nm (ang. *cap layer*) oraz powłokę Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> o grubości 100 nm chroniącą warstwę powierzchniową przed utlenieniem i stopieniem podczas naświetlania. Następnie podgrzano laserem kontur prostokąta do temperatury do 1000°C. Wywołało to termiczną dyfuzję atomów Ga i Al w górnych warstwach próbki, co doprowadziło do lokalnego poszerzenia szerokości przerwy energetycznej, a zatem do powstania bariery potencjału otaczającej prostokątny obszar. Rozmiary prostokątnych konturów, a co za tym idzie kropek kwantowych wytworzonych tą metodą, mieściły się w przedziale 250–2000 nm.

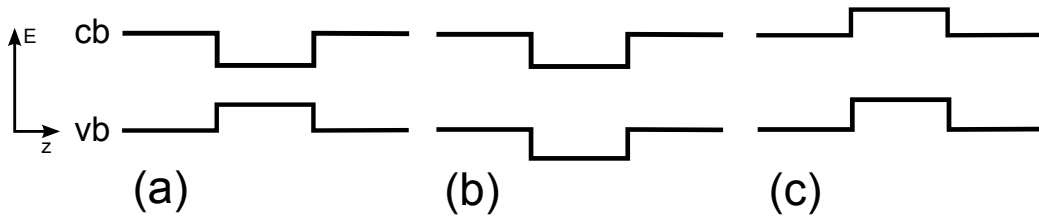
## 1.2 Podział kropek kwantowych

Kropki kwantowe zwykle dzieli się w zależności od tego jak są wytwarzane. Wyróżnia się np. kropki samorosnące, kropki wytrawiane lub kropki „naturalne”. Można również podzielić kropki, w zależności od kształtu, na poprzeczne i pionowe. Innym kryterium podziału, istotnym z punktu widzenia właściwości optycznych tych struktur, jest układ pasm energetycznych.

Jeśli układ pasm energetycznych jest taki, jak to przedstawia rysunek 1.3a, pusta kropka kwantowa może wiązać zarówno elektrony, jak i dziury. Taką kropkę będziemy nazywać **kropką pierwszego rodzaju**, a układ pasm — układem pierwszego rodzaju. Z drugiej strony, jeżeli układ pasm energetycznych jest taki, jak to przedstawiono na rysunku 1.3b oraz 1.3c, pusta kropka kwantowa może wiązać tylko nośniki ładunku o jednym znaku, podczas gdy stanowi barierę dla nośników o znaku przeciwnym. Taką kropkę nazywamy **kropką drugiego rodzaju**, a układ pasm — układem drugiego rodzaju. W szczególności wszystkie kropki kwantowe zadawane polem elektrycznym są kropkami drugiego rodzaju.

W przypadku kropek z jednego półprzewodnika, utworzonych w materiale innego półprzewodnika, efektywny potencjał, odczuwany przez nośniki ładunku, wynika z różnicy lokalnych krawędzi pasm energetycznych. Jednak za sprawą naprężeń występujących w tego typu strukturach, układ pasm

<sup>5</sup>Ang. *Electron-Beam Lithography*, EBL.



Rysunek 1.3: Układ pasm energetycznych w kropkach kwantowych pierwszego (a), oraz drugiego rodzaju (b) oraz (c). Kropka kwantowa drugiego rodzaju, która przyciąga elektrony stanowiąc barierę dla dziur ma układ pasm taki jak to przedstawiono na rysunku (b), podczas gdy kropka pułapkująca dziury, która stanowi barierę dla elektronów, ma układ pasm przedstawiony na rysunku (c).

energetycznych w kropce może różnić się znacząco od układu pasm z jakim mamy do czynienia w litym półprzewodniku. Niemniej jednak, jeśli rozważymy strukturę pasmową, która byłaby obecna w litym półprzewodniku, w obecności takich samych naprężeń jakie występują w kropce (równania rządzące naprężeniami są niezmiennicze względem zmiany skali układu), stanie się możliwe, wyznaczenie przybliżonej energii tych pasm (w przybliżeniu masy efektywnej — zobacz podrozdział 3.1).

Pryor i Pistol [38] używając teorii  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  (uwzględniającej naprężenia) wyznaczyli energie pasm i masy efektywne dla kropek kwantowych o kształcie soczewki utworzonych z różnych kombinacji następujących półprzewodników: AlN, GaN, InN, GaP, GaAs, InP, InAs, GaSb oraz InSb. Dodatkowo, posługując się modelem kropki o kształcie cylindra o takiej samej średnicy i objętości co dana kropka w kształcie soczewki oraz odpowiednio dobranej wysokości, wyznaczyli oni energie wiązań w ww. kropkach.

Warto tu zaznaczyć, że w skrajnym przypadku naprężenia występujące w kropkach mogą nawet „odwrócić” któreś z pasm tak, że utworzona kropka będzie innego typu niż wynikałoby to z układu pasm litych półprzewodników. Dla przykładu kropki z InSb na podłożu z InP jak wynika z obserwacji doświadczalnych [39, 40] oraz obliczeń Pryora i Pistola charakteryzują się strukturą drugiego rodzaju, choć układ pasm litych półprzewodników InSb i InP jest układem pierwszego rodzaju.

### 1.3 Ekscytony w kropkach kwantowych

W kryształach elektron oddziałuje ze wszystkimi atomami sieci. Aby uniknąć skomplikowanego opisu tego oddziaływania wprowadza się opis, w któ-

rym elektron jest zastępowany kwazicząstką (nazywaną czasem „elektronem w kryształach” [41]), która nie oddziałuje z okresowym potencjałem kryształu, ale za to posiada inną niż prawdziwy elektron masę, zwaną masą efektywną  $m_e^*$  (porównaj podrozdział 3.1). Taki sam opis stosuje się do dziury czyli pustego miejsca w paśmie walencyjnym które zostało zwolnione przez elektron wzbudzony do pasma przewodnictwa.

Ekscyton to para elektron-dziura takich kwazicząstek, sama też będąca kwazicząstką, związana przyciąganiem kulombowskim.

W ciałach stałych rozróżniamy dwa rodzaje ekscytonów. Ekscytony Frenkla, o małych rozmiarach i silnym wiązaniu i ekscytony Wanniera-Motta, w których elektron i dziura są słabo związane, a odległość między nimi jest duża w porównaniu do stałej sieci. Takimi ekscytonami będziemy się w dalszym ciągu zajmować.

W litym półprzewodniku skala energetyczna ekscytonów określona jest przez efektywną stałą Rydberga

$$1\text{Ry}^* = \frac{m_e^*}{2\hbar^2} \left( \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2,$$

która dla typowych półprzewodników jest rzędu  $10^{-2}$  meV. W studniach kwantowych natomiast, energia wiązania ekscytonów na skutek zbliżenia do siebie elektronu i dziury<sup>6</sup> może powiększyć się nawet czterokrotnie.

Kropki kwantowe zwykle powstają na skutek ograniczenia ruchu nośników w bardzo cienkich studniach kwantowych. Możliwość powstania ekscytonu związanego na takich strukturach nie budzi wątpliwości kiedy mamy do czynienia z kropkami pierwszego rodzaju. Kropki takie z uwagi na układ pasm przyciągają zarówno elektrony, jak i dziury. Dodatkowo oba typy nośników przyciągają się wzajemnie i nic nie stoi na przeszkodzie żeby powstał ekscyton.

Sytuacja jest zgoła odmienna w przypadku kropek kwantowych drugiego rodzaju. Układ pasm w tych kropkach jest taki, że pusta kropka przyciąga jeden rodzaj nośników ładunku, podczas gdy dla drugiego stanowi barierę (porównaj rysunek 1.3). Jednak jeśli w takiej kropce jest już uwięziona jedna cząstka, dla której kropka stanowi centrum przyciągające, na skutek przyciągania kulombowskiego może zostać utworzony ekscyton.

Wiązanie ekscytonu w kropce kwantowej drugiego rodzaju, ze względu na swój charakter (jedna z cząstek jest utrzymywana tylko wtedy, gdy przyciąganie kulombowskie przeważa nad odpychaniem kropki, która dla tej cząstki stanowi barierę) jest silnie czułe na geometryczne rozmiary kropki i wpływ

<sup>6</sup> Jak wiadomo z mechaniki kwantowej  $1\text{Ry}^{2D} = 4\text{Ry}^{3D}$  (zobacz np. [42]).



pól magnetycznego i elektrycznego. Ponadto najciekawsze jakościowe różnice pomiędzy kropkami kwantowymi pierwszego i drugiego rodzaju opisane w dalszej części rozprawy, są konsekwencją odmiennej budowy ekscytynu w tych strukturach.

Ekscytyny nie są jedynymi możliwymi kompleksami jakie tworzą się w kropkach drugiego rodzaju. Możliwe jest również powstawanie bardziej złożonych kompleksów [43] takich jak e-e-h (trion  $X^-$ ) lub e-h-h (trion  $X^+$ ). Zaobserwować je można, gdy użyje się wyższych mocy do oświetlenia próbki.

## 1.4 Modelowe potencjały kropek kwantowych

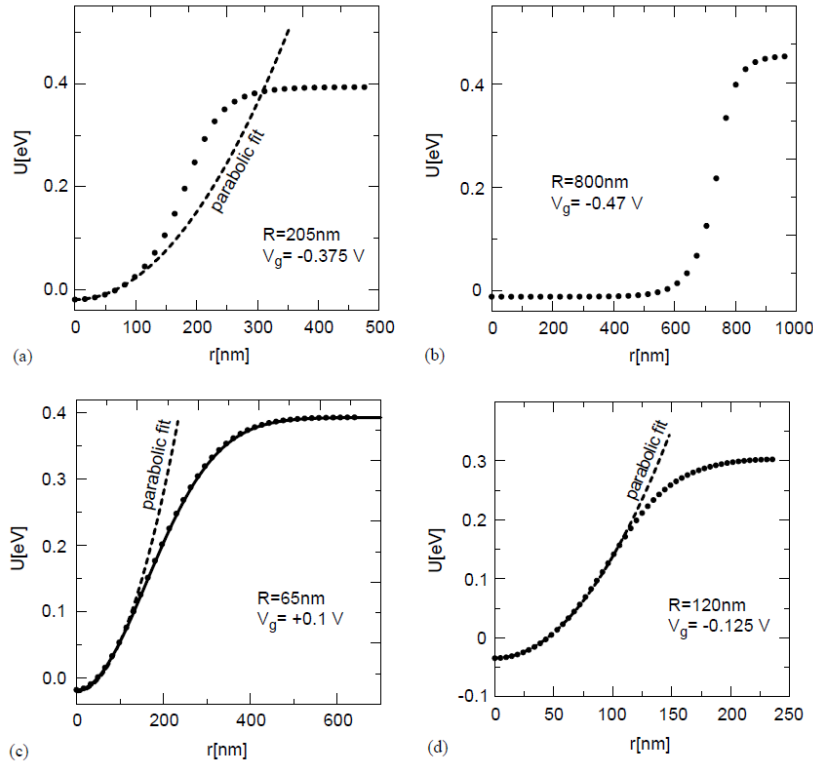
Jeśli kropka kwantowa została wytworzona przez ograniczenie ruchu nośników ładunku w bardzo cienkiej studni kwantowej energia wzbudzeń jednocząstkowych w poprzek powstałej struktury przeważa inne charakterystyczne energie, wobec czego związane nośniki ładunku można traktować w przybliżeniu jako dwuwymiarowe, a do modelowania kropki można użyć potencjału dwuwymiarowego. Taki potencjał nazywa się bocznym potencjałem wiążącym (ang. *lateral confinement*) i, z uwagi na fakt, że jest on pozbawiony osłabienia (w przeciwieństwie do potencjału kulombowskiego w atomach), bywa on często modelowany za pomocą gładkich potencjałów o prostej postaci jak np. potencjał paraboliczny, potencjał gaussowski, czy też potencjał Pöschla-Tellera [1, 44]. Wszystkie te potencjały posiadają symetrię cylindryczną, a zatem służą do modelowania kropek również taką symetrię posiadających lub takich, w których odchyłki od cylindryczności są niewielkie.

Cechą charakterystyczną potencjału parabolicznego

$$V(\mathbf{r}) = V_0 + k\rho^2$$

są nieskończenie wysokie ściany, tak więc potencjał ten może dobrze służyć do opisu głębokich kropek, natomiast nie nadaje się do opisu płytkich, małych kropek w których istotne stają się efekty związane z brzegami kropki i stanami rozproszonymi. Potencjał paraboliczny jest często stosowany do modelowania wielu rodzajów kropek kwantowych, szczególnie samorosnących [45, 46, 47], ale nadaje się również do modelowania dużych, wieloelektronowych kropek zadawanych polem elektrycznym.

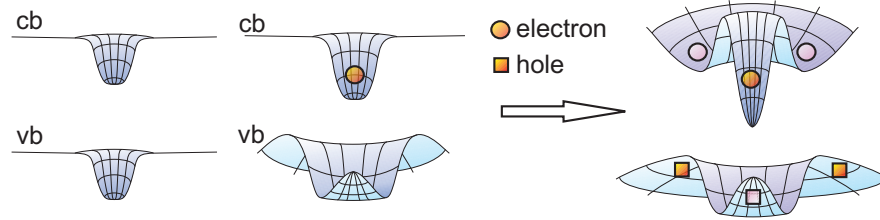
W pracy [48] opisane zostały numeryczne wyniki rozwiązywania samouzgodnionych równań Poissona i Schrödingera w przybliżeniu Hartree dla kropki kwantowej zadawanej polem elektrycznym. Obliczenia były przeprowadzone dla elektrody o powierzchni  $300 \times 300 \text{ nm}^2$  i grubości 30 nm, znajdującej się nad studnią kwantową GaAs/AlGaAs. Pomimo kwadratowego kształtu elektrody potencjał wiążący pod elektrodą okazał się w przybliżeniu



Rysunek 1.4: Energia potencjalna wyliczona z równania Poissona (kropki), dopasowanie paraboliczne (linie kreskowane) i dopasowanie gaussianem (linia ciągła). (a) Parametry zgodne z kropką kwantową opisaną w pracy [29], (b) prawie prostokątna studnia potencjału, (c) studnia gaussowska, (d) studnia w przybliżeniu paraboliczna.  $R$  to promień elektrody znajdującej się ponad studnią kwantową, a  $V_g$  to napięcie przyłożone do elektrody. (za [52]).

kołowo-symetryczny [48], a odległości pomiędzy poziomami energetycznymi prawie nie zależały od liczby elektronów, co świadczy o paraboliczności potencjału [49]. Podobne obliczenia dla wieloelektronowych, pionowych kropek kwantowych opisane zostały w pracy [50], gdzie wykazano, że odstępstwa od paraboliczności potencjału dla takich struktur są niewielkie dla małej liczby elektronów. W pracach [51, 52] wykazano natomiast, że zmieniając geometrię elektrody naniesionej nad strukturę opisaną w pracy [29] (studnia kwantowa GaAs/AlGaAs) można uzyskać potencjały o różnych kształtach (rysunek 1.4), co może umożliwić projektowanie nanourządzeń o pożądanym cechach.

Jak widać z rysunku 1.4c do modelowania nieco mniejszych kropek niż w przypadku 1.4d, gdzie do dopasowania użyto paraboli, znakomicie nadaje się



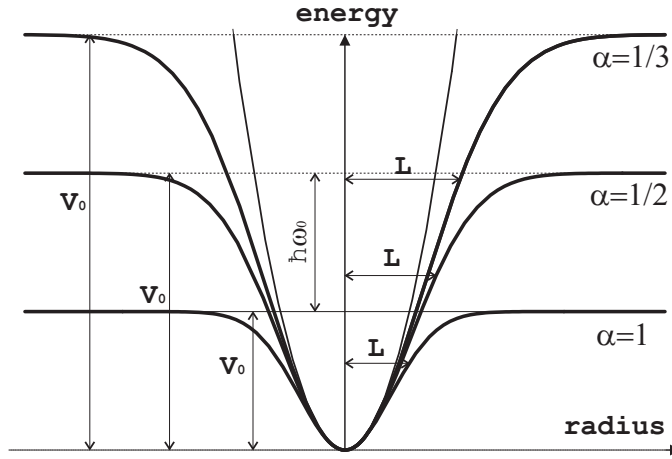
Rysunek 1.5: Tworzenie się ekscytonu w kropce kwantowej drugiego rodzaju. Kropka drugiego rodzaju, która przyciąga elektrony i stanowi barierę dla dziury (po lewej). W kropce zostaje uwięziony elektron (w środku), co skutkuje zmianą w potencjale efektywnym dla dziury, która teraz może zostać uwięziona w pierścieniu dookoła kropki. Uwięzienie dziury (po prawej) powoduje modyfikację efektywnego potencjału odczuwanego przez elektron.

potencjał gaussowski [1, 53]. Zastosowanie tego potencjału staje się szczególnie pożądane w przypadku małych kropek (posiadających niewielką liczbę poziomów energetycznych) do opisu których potencjał paraboliczny jest nieodpowiedni. Potencjał gaussowski umożliwia w takich strukturach prawidłowy opis wyższych stanów energetycznych, gdzie efekty związane z brzegami kropki zaczynają odgrywać istotną rolę. Inną zaletą potencjału gaussowskiego jest możliwość przybliżenia go w pobliżu dna potencjałem parabolicznym o takiej samej krzywiznie, co wykorzystamy w rozdziale 7 przy rozpatrywaniu średnich i dużych kropek kwantowych w stałym polu elektrycznym. Kolejnym jego atutem, atutem którego nie posiada potencjał paraboliczny, jest możliwość opisu ekscytonów w kropkach kwantowych drugiego rodzaju wychodząc z zasad pierwszych (rysunek 1.5). Mianowicie modyfikacja pochodzącego od kropki kwantowej potencjału odpychającego (dla jednej z cząstek np. dziury) jaką powoduje przyciąganie kulombowskie drugiej, uwięzionej w kropce, powoduje, że potencjał staje się efektywnie przyciągający — tworzy się w nim dolina w kształcie pierścienia dookoła kropki, w której pierwotnie odpychana cząstka może zostać uwięziona. Z uwagi na fakt, że potencjał gaussowski posłuży nam do opisu kropek drugiego rodzaju m.in. w polu magnetycznym, i w polu elektrycznym, przedstawimy teraz szczegółowy model gaussowskiej kropki kwantowej.

Rozważany przez nas potencjał gaussowski ma następującą postać

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 \exp\left(-\frac{\rho^2}{L^2}\right), \quad (1.1)$$

gdzie  $V_0$  jest głębokością potencjału, a  $L$  jego szerokością charakterystyczną (rysunek 1.6). W naszym modelu ograniczymy się do potencjału gaussowskiego o stałej krzywiznie. Przyrównując do  $m_e \omega_0 \rho^2 / 2$ , gdzie  $m_e$  jest masą



Rysunek 1.6: Model gaussowskiej kropki kwantowej. Rysunek wyjaśnia znaczenie parametru  $\alpha = \hbar\omega_0/V_0$  kontrolującego rozmiar kropki kwantowej o stałej krzywiznie  $\omega_0^2 = 2V_0/m_eL^2 = \text{const.}$

elektronu, drugi człon rozwinięcia (1.1) w szereg otrzymujemy

$$\omega_0^2 = \frac{2V_0}{m_eL^2}. \quad (1.2)$$

Warunek na stałą krzywiznę, w przełożeniu na parametry potencjału, ma więc postać  $V_0/L^2 = \text{const.}$  Za jednostkę energii w dalszej części naszych rozważań przyjmować będziemy  $\hbar\omega_0$ , a za jednostkę długości, długość charakterystyczną dla oscylatora harmonicznego o tej energii, czyli

$$\lambda_0^2 = \frac{\hbar}{m_e\omega_0}. \quad (1.3)$$

Parametr kontrolujący rozmiar kropki przyjmujemy w postaci

$$\alpha = \frac{\hbar\omega_0}{V_0}, \quad (1.4)$$

a jego znaczenie zostało objaśnione na rysunku 1.6. Korzystając z (1.2) możemy też znaleźć związek pomiędzy  $\alpha$  i charakterystycznymi dla naszej struktury długościami

$$\alpha = \frac{2\lambda_0^2}{L^2}. \quad (1.5)$$

Kolejnym modelem, który jednak znacznie odbiega od pozostałych dwóch, jest studnia prostokątna

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_0, & \text{jeżeli } \rho > R \\ 0, & \text{jeżeli } \rho < R \end{cases}$$

używana do modelowania potencjału trawionych kropek o znacznych rozmiarach, a także odpowiednia do modelowania potencjału w przypadku dużych kropek zadawanych polem elektrycznym [52]. Jako potencjału modelowego użyjemy jej m.in. do opisu kropek kwantowych drugiego rodzaju w polu magnetycznym (w tym m.in. do demonstracji oscylacji Aharonova-Bohma w widmie tych struktur).

## 1.5 Stany związane w strukturach niskowymiarowych

Z mechaniki kwantowej wiadomo [54, 55, 56, 57, 58], że w jednym wymiarze, dla każdego potencjału, który w całości leży poniżej zerowego poziomu energii, i który asymptotycznie dąży do zera dla  $|x| \rightarrow \infty$ , istnieje zawsze stan związany o ujemnej energii. Dowiedzieć tego można posługując się zasadą wariacyjną [55, 58], rachunkiem zaburzeń [54] lub rozwiązując równanie Schrödingera dla prostokątnej studni potencjału, którą możemy wpisać w nasz potencjał [56].

Dla potencjałów o dowolnym kształcie, co zostało pokazane przy pomocy zasady wariacyjnej [59], warunkiem wystarczającym na istnienie stanu związanego, jest

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx < 0, \quad (1.6)$$

a z uwagi na fakt, że każdy potencjał postaci  $\lambda V(x)$ , z dowolnie małym parametrem  $\lambda > 0$ , także spełnia tę nierówność, więc stan związany istnieje dla dowolnie małych potencjałów.<sup>7</sup>

Szczególnie interesującym przypadkiem potencjałów są tzw. *volcano-shaped potentials*, tzn. potencjały asymptotycznie dążące do zera, ale miejscami wznoszące się ponad zerowy poziom energii. Istnienie stanów związanych o zerowej energii w takich potencjałach jest obecnie przedmiotem badań fizyków zajmujących się fizyką wysokich energii [60, 61] oraz fizyką teoretyczną [62, 63].

W dwóch wymiarach, podobnie jak w jednym wymiarze, stan związany istnieje nawet dla nieskończenie małej studni potencjału, jeżeli tylko potencjał w całości znajduje się poniżej zerowego poziomu energii i asymptotycznie zmierza do zera, gdy  $r \rightarrow \infty$ . Dowód na istnienie stanów związanych dla takich potencjałów wykorzystujący zasadę wariacyjną Rayleigha–Ritza moż-

<sup>7</sup> Odwrotność tego twierdzenia, tzn. twierdzenie, że jeśli  $\int_{-\infty}^{\infty} V(x)dx > 0$ , to nie istnieje stan związany nie jest w ogólności prawdą [66]. Znaczy to, że mogą istnieć potencjały, które nie spełniają warunku (1.6), a w których istnieje stan związany.

na znaleźć w pracy [64], a wykorzystujący rachunek zaburzeń w podręczniku [54]. Z kolei dla dwuwymiarowych potencjałów o dowolnym kształcie również prawdziwy jest odpowiednik argumentu związanego z warunkiem (1.6), z tą różnicą, że potencjał  $V(x)$  obłożony jest dodatkowymi wymogami [59].

W trzech wymiarach aby mógł powstać stan związany rozmiary przestrzenne i głębokość studni muszą spełniać pewien warunek, który w przypadku studni prostokątnej przedstawia się następująco  $V_0 a^2 > \pi^2 \hbar^2 / 8m$  [65, 56], gdzie  $V_0$  jest głębokością studni, a  $a$  jej promieniem<sup>8</sup>. Ogólnie rzecz biorąc, jeżeli trójwymiarowa studnia będzie wystarczająco mała, to nawet jeśli potencjał w całości będzie leżał poniżej zerowego poziomu energii, i asymptotycznie dążył do zera dla  $r \rightarrow \infty$ , nie pojawi się w niej żaden stan związany.

Ogólną dyskusję istnienia stanów związanych w D-wymiarach ( $0 < D < \infty$ ) znaleźć można w pracy Nieto [62], który analizuje rozwiązania D-wymiarowego, radialnego, równania Schrödingera.

Biorąc pod uwagę powyższe rozważania możemy przypuszczać, że posługując się modelem dwuwymiarowym kropki kwantowej możemy natrafić na pewne artefakty (stan związany nawet dla bardzo małej kropki) wynikające z naszej teorii. Dlatego ze szczególną ostrożnością należy traktować płytkie kropki kwantowe o małych wymiarach przestrzennych w których mamy do czynienia z tylko jednym stanem związanym.

<sup>8</sup> Wielu autorów usiłuje objaśnić ten fakt korzystając z zasady nieoznaczoności Heisenberga. Ich argumentacja, dla studni prostokątnej, opiera się na założeniu, że  $\Delta x \sim a$ . Wtedy z zasady nieoznaczoności wynika, że  $\Delta p \sim \hbar/2a$ . Można założyć, że  $p_{max} \sim \Delta p$ , a stąd cząstka jest związana jeśli tylko  $V_0 > p_{max}^2/2m = \hbar^2/8ma^2$ . Co stanowi dość dobre przybliżenie ścisłego wyniku. Powyższy argument jest uniwersalny, więc powinien się również stosować do przypadku jedno- i dwuwymiarowej studni potencjału. Jednak, na co zwrócili uwagę Buell i Shadwick [66], z uwagi na uprzednio omówiony przez nas warunek (1.6), wystarczający w przypadku jednowymiarowym na to aby istniał stan związany, (oraz jego odpowiednik w przypadku dwuwymiarowym), prowadzi to do sprzeczności.

Błędem w argumentowaniu z zasady nieoznaczoności, na co wskazują wskazują Buell i Shadwick, jest założenie, że szerokość potencjału  $a$  jest wyznacznikiem wartości  $\Delta x$ . W rzeczywistości, kiedy głębokość potencjału dąży do zera, funkcja falowa stanu podstawowego staje się nieskończenie szeroka i bez znalezienia jej dokładnej postaci nie można określić wartości  $\Delta x$ . W szczególności nie istnieje uzasadnienie dla założenia, że wielkość  $\Delta x$  będzie porównywalna z pewnym „charakterystycznym” rozmiarem potencjału [66].

## Rozdział 2

# Własności optyczne nanostruktur półprzewodnikowych

Przewodność elektryczna  $\sigma$  jest wielkością za pomocą której można opisać rozpraszanie energii przez zaburzony układ. W naszym przypadku zaburzeniem będzie padająca, płaska fala elektromagnetyczna. Pole elektryczne takiej fali można przedstawić za pomocą wzoru  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = 2\mathbf{e}E_0 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ , gdzie  $\mathbf{e}$  jest wektorem polaryzacji o jednostkowej długości,  $E_0$  amplitudą pola, a czynnik 2 został wprowadzony dla wygody. Pole magnetyczne można zaniedbać ponieważ jego wpływ jest znikomy w porównaniu z polem elektrycznym.

Klasycznie pole elektryczne indukuje prąd, którego składowa zgodna w fazie to  $\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E}$ . Prowadzi to do rozpraszania energii w tempie  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}$  na jednostkę objętości. Uśrednienie po czasie daje całkowitą moc rozpraszaną w objętości  $\Omega$  wynoszącą  $2\sigma\Omega E_0^2$ . Aby otrzymać wyrażenie na przewodność elektryczną zwykle porównuje się [67] ten rezultat z rezultatem obliczeń kwantowomechanicznych, które będą przedmiotem następnego podrozdziału.

### 2.1 Oddziaływanie nośników ładunku z polem elektromagnetycznym

Hamiltonian cząstki o masie  $m$  i ładunku  $q$  w polu fali elektromagnetycznej ma postać

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + V_{kr}, \quad (2.1)$$

gdzie  $V_{kr}$  jest potencjałem pochodzącym od kryształu, w którym znajduje się cząstka. Hamiltonian ten nie zawiera bezpośrednio pola elektrycznego, lecz powiązany z nim potencjał wektorowy  $\mathbf{A}$ . Związek pomiędzy polem elektrycznym i potencjałem wektorowym ma postać  $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t$ . Tak więc dla pola  $\mathbf{E}$  z początku tego rozdziału mamy  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = (2\mathbf{e}E_0/\omega) \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$ .

Różnica hamiltonianu (2.1) i tego samego hamiltonianu bez pola jest zaburzeniem związanym z falą elektromagnetyczną. Ma ono postać

$$\hat{V} = -\frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} - q\mathbf{A}^2). \quad (2.2)$$

Ostatni człon pomijamy jako człon drugiego rzędu. Człon środkowy, biorąc pod uwagę fakt, że  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ , może być zapisany, w działaniu na funkcję, jako suma dwóch składników  $-i\hbar(\nabla \cdot \mathbf{A})\Phi - i\hbar(\mathbf{A} \cdot \nabla)\Phi$ . Pierwszy z nich znika jeśli mamy do czynienia z falą poprzeczną ponieważ  $\mathbf{e} \perp \mathbf{q}$ . Drugi natomiast, w połączeniu z pierwszym składnikiem wzoru (2.2), prowadzi do ostatecznej postaci wzoru na zaburzenie  $\hat{V} = -(q/m)\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ .

Jeśli teraz wstawimy nasz potencjał wektorowy, wyrażony za pomocą liczb zespolonych, do uzyskanego powyżej wyrażenia na zaburzenie, otrzymamy

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = -\frac{qE_0}{im\omega} \{ \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] + \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \} \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (2.3)$$

Pierwszy składnik tego wzoru opisuje absorpcję, a drugi emisję, fotonu o energii  $\hbar\omega$  i pędzie  $\hbar\mathbf{k}$ . W typowych eksperymentach z udziałem kropek kwantowych mamy do czynienia z fotonami z zakresu podczerwieni (przejścia międzypasmowe) lub dalekiej podczerwieni (przejścia wewnątrzpasmowe). Długość fali tych fotonów jest znacznie większa od rozmiarów typowej kropki kwantowej. Możemy więc w powyższym wzorze położyć  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , i traktować pole jako stałe w obrębie naszej nanostruktury. Przybliżenie takie nosi nazwę *przybliżenia dipolowego*.

Wstawiając pierwszą część wzoru (2.3), odpowiadającą absorpcji, do złotej reguły Fermiego otrzymujemy prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu ze stanu  $i$  do stanu  $f$

$$T_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{qE_0}{m\omega} \right)^2 |\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (2.4)$$

Żeby dostać moc absorbowaną przez układ musimy pomnożyć powyższe wyrażenie przez energię każdego fotonu  $\hbar\omega$ , posumować po wszystkich stanach początkowych i końcowych, a następnie pomnożyć wynik przez  $f(E_i)$  oraz  $[1 - f(E_f)]$  aby zagwarantować, że stan  $i$  jest zapełniony, a stan  $f$  niezapełniony. Dodatkowo, ze względu na spin, musimy nasze wyrażenie pomnożyć



przez 2. W wyniku otrzymujemy

$$P_{abs} = 2\hbar\omega \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{qE_0}{m\omega} \right)^2 \sum_{i,f} |\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 f(E_i) [1 - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).$$

Moc emitowaną przez układ  $P_{em}$ , związaną z drugim członem wzoru (2.3), otrzymamy zmieniając znak przy  $\omega$ . Następnie możemy zamienić nieme wskaźniki w sumowaniu, tak, aby delta Diraca we wzorach na  $P_{abs}$  i  $P_{em}$  była identyczna. Teraz dodając oba te wyrażenia otrzymamy całkowitą moc absorbowaną przez nasz układ

$$P = 2\hbar\omega \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{qE_0}{m\omega} \right)^2 \sum_{i,f} |\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).$$

Porównując to wyrażenie z otrzymanym przez nas wcześniej wyrażeniem klasycznym, znajdujemy

$$\sigma(\omega) = \frac{2}{\Omega} \frac{\pi q^2}{m^2 \omega} \sum_{i,f} |\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle|^2 [f(E_i) - f(E_f)] \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (2.5)$$

## 2.2 Przejścia międzypasmowe

Wyznamy teraz element macierzowy występujący we wzorze (2.5) dla przejść międzypasmowych. Będziemy rozpatrywać przejścia ze stanu w paśmie walencyjnym  $v$ , do stanu w paśmie przewodnictwa  $c$ .

Niech  $\chi$  będzie funkcją obwiedni, a  $u_{n\mathbf{0}}$  funkcją Blocha w punkcie  $\Gamma$ . Jeśli obie te funkcje są z osobna unormowane do jedności, możemy przedstawić funkcję falową cząstki w kryształach w postaci ich iloczynu

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Omega^{1/2} \chi(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r}),$$

gdzie  $\Omega$  jest objętością próbki i gwarantuje, że powyższa funkcja jako całość jest również unormowana do jedności. Element macierzowy przybiera postać

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle = \Omega \int \chi_c^*(\mathbf{r}) u_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \chi_v(\mathbf{r}) u_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.6)$$

Funkcje obwiedni są prawie stałe w każdej komórce elementarnej, możemy więc dla każdej komórki z osobna wyciągnąć je przed znak całki, co prowadzi do pojawienia się w naszym wzorze sumy po komórkach

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \approx \Omega \sum_j^{\text{komórki}} \chi_c^*(\mathbf{r}_j) \chi_v(\mathbf{r}_j) \int_{\substack{j\text{-ta} \\ \text{komórka}}} u_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) u_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Jeśli teraz wprowadzimy oznaczenie

$$p_{cv}(\mathbf{0}) = N \int_{\text{kom.}} u_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) u_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

gdzie  $N$  to liczba komórek w kryształ, to, z uwagi na fakt, że  $\Omega = N\Omega_k$ , nasz element macierzowy będzie równy

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \approx p_{cv}(\mathbf{0}) \Omega_k \sum_j^{\text{komórki}} \chi_c^*(\mathbf{r}_j) \chi_v(\mathbf{r}_j),$$

lub ostatecznie

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \approx p_{cv}(\mathbf{0}) \int \chi_c^*(\mathbf{r}) \chi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.7)$$

Tak więc aby przejścia międzypasmowe były dozwolone całka przekrywania funkcji obwiedni nie może zniknąć oraz element dipolowy (uwzględniający polaryzację) przejścia między funkcjami Blocha musi być niezerowy.

## 2.3 Przejścia wewnątrzpasmowe

Operator  $\hat{\mathbf{p}}$  we wzorze (2.6) jest pochodną. Możemy więc przepisać ten wzór w postaci

$$\begin{aligned} \langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle &= \Omega \int \chi_c^*(\mathbf{r}) \chi_v(\mathbf{r}) [u_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) u_v(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \\ &+ \Omega \int u_c^*(\mathbf{r}) u_v(\mathbf{r}) [\chi_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \chi_v(\mathbf{r})] d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Postępując podobnie jak w poprzednim podrozdziale otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle &\approx \int \chi_c^*(\mathbf{r}) \chi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \int u_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) u_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &+ \int u_c^*(\mathbf{r}) u_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \int \chi_c^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \chi_v(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Dla przejść wewnątrzpasmowych  $c = v$  i pierwszy człon po prawej stronie powyższego wzoru znika. Ponieważ funkcje Blocha są unormowane do jedności otrzymujemy

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \approx \int \chi^*(\mathbf{r}) (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \chi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (2.8)$$

gdzie  $\chi$  jest funkcją obwiedni cząstki z pasma przewodnictwa, lub z pasma walencyjnego.

Aby przejścia wewnątrzpasmowe były dozwolone element dipolowy (uwzględniający polaryzację) przejścia między funkcjami obwiedni musi być niezerowy.

# Rozdział 3

## Opis ekscytonu w kropce kwantowej

W rozdziale tym przedstawimy opis ekscytonu związanego na kropce kwantowej metodą masy efektywnej. Wprowadzimy również przybliżenie pola samouzgodnionego i przybliżenie Hartree, z którego będziemy korzystać w dalszej części rozprawy.

### 3.1 Metoda masy efektywnej

Strukturę pasmową kryształu można w znacznej mierze zignorować i rozpatrywać jedynie cząstkę poruszającą się w lokalnym ekstremum danego pasma półprzewodnika. W takim przypadku możemy potraktować naładowaną cząstkę o masie  $m$ , poruszającą się w kryształ pod wpływem zewnętrznych pól, tak, jakby była cząstką swobodną o *masie efektywnej* danej za pomocą wyrażenia

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}, \quad i, j = x, y, z,$$

w którym energia wzięta jest w ekstremum pasma. Jest to wielkość tensorowa, co oznacza, że w ogólności masa efektywna zależy od kierunku w którym porusza się cząstka. W dalszej części rozważać będziemy jedynie półprzewodniki, takie jak GaAs, w których zależność energii od wektora falowego jest w pobliżu punktów ekstremalnych pasm w przybliżeniu izotropowa. W takim przypadku masa efektywna staje się skalarem, a zależność energii od wektora falowego przybiera postać podobną do wyrażenia na energię cząstki swobodnej, z tą jednak różnicą, że zamiast masy cząstki pojawia się masa efektywna  $m^*$ , a sama energia liczona jest od dna pasma.

Z teorii masy efektywnej wynika ponadto [67], że jeśli kropkę kwantową potraktujemy jako lokalne zaburzenie periodycznego pola kryształu, będziemy mogli funkcję falową cząstki zapisać (w przybliżeniu) jako iloczyn funkcji Blocha w lokalnym ekstremum pasma i *funkcji obwiedni* (ang. *envelope function*). Warunkiem stanowiącym o poprawności tego przybliżenia jest, aby funkcja obwiedni, a co za tym idzie również lokalny potencjał zaburzający, wolno zmieniały się w przestrzeni rzeczywistej na odległości porównywalnej ze stałą sieci krystalicznej. Narzuca to ograniczenie na rozmiary kropki kwantowej którą możemy poprawnie opisać posługując się tym przybliżeniem. Dla przykładu stała sieci GaAs wynosi około 0,5 nm, tak więc w przypadku kropek o rozmiarach rzędu kilkudziesięciu nanometrów założenie to powinno być spełnione.

Równanie na funkcję obwiedni, które dostajemy w przybliżeniu masy efektywnej [67], jest równaniem Schrödingera swobodnej cząstki o masie  $m^*$ , w którym energia liczona jest od dna pasma. Aby więc wyznaczyć energie ekscytonu (pary elektron-dziura) związanego na kropce kwantowej musimy rozwiązać równanie Schrödingera dla tego układu z hamiltonianem, w którym masy cząstek zastąpione zostały masami efektywnymi, a potencjał, który te cząstki odczuwają, pochodzi tylko od kropki kwantowej. W wyniku rozwiązania tego równania dostaniemy energie wiązania ekscytonu i funkcje falowe, które w rzeczywistości są funkcjami obwiedni.

Hamiltonian ekscytonu na kropce kwantowej ma więc w przybliżeniu masy efektywnej postać

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_h + \hat{V}_C, \quad (3.1)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{H}_e &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 + V_e(\mathbf{r}_e), \\ \hat{H}_h &= -\frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla_h^2 + V_h(\mathbf{r}_h), \end{aligned}$$

$m_e$  i  $m_h$  to masy efektywne odpowiednio elektronu i dziury,  $V_e$  ( $V_h$ ) to oddziaływanie elektronu (dziury) z potencjałem kropki kwantowej, natomiast

$$\hat{V}_C = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}$$

to energia oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronem a dziurą. We wzorze tym  $\epsilon$  to względna przenikalność elektryczna półprzewodnika w którym znajdują się elektron oraz dziura,  $\epsilon_0$  to stała dielektryczna, a  $q$  to ładunek elementarny.

## 3.2 Przybliżenie pola samouzgodnionego

Równanie na wartości własne dla ekscytonu w kropce kwantowej przybiera postać

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h).$$

Funkcja falowa ekscytonu w powyższym równaniu jest funkcją współrzędnych elektronu i dziury  $\Psi = \Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ , a ponieważ elektron i dziura oddziałują między sobą, hamiltonianu (3.1) nie da się przedstawić w postaci sumy wyrazów z których każdy zależy tylko od współrzędnych jednej cząstki, a co za tym idzie nie da się rozseparować równania Schrödingera. Hamiltonian będziemy mogli przedstawić w postaci sumy wyrazów, z których każdy zależy od współrzędnych tylko jednej z cząstek, wtedy, gdy efekt oddziaływania danej cząstki z pozostałą przybliżymy pewnym potencjałem, który będzie funkcją współrzędnych tylko tej cząstki. Przybliżenie takie nosi nazwę *przybliżenia pola samouzgodnionego*.

Jeżeli skorzystamy z przybliżenia pola samouzgodnionego będziemy mogli rozseparować równanie Schrödingera, a co za tym idzie, będziemy mogli przedstawić funkcję falową ekscytonu w postaci iloczynu jednocząstkowych funkcji falowych elektronu i dziury.

## 3.3 Przybliżenie Hartree

W przybliżeniu Hartree oddziaływanie jednej cząstki z drugą zastąpione zostało potencjałem, który jest funkcją współrzędnych tylko tej pierwszej cząstki, i który ma postać pola kulombowskiego, wywołanego przez rozmyty ładunek drugiej cząstki. Przybliżenie to wynika z optymalnego rachunku wariacyjnego z funkcją próbną w postaci iloczynu funkcji falowych poszczególnych cząstek [68, 69]. Procedura wariacyjna polega więc na minimalizacji energii  $\iint \Psi^* \hat{H} \Psi d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h$  przy założeniu, że

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_e(\mathbf{r}_e) \psi_h(\mathbf{r}_h) \quad (3.2)$$

i prowadzi do równań Hartree [65]. W przypadku ekscytonu w kropce kwantowej mają one postać

$$\hat{\mathcal{H}}_e \psi_e(\mathbf{r}_e) = \varepsilon_e \psi_e(\mathbf{r}_e), \quad (3.3)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_h \psi_h(\mathbf{r}_h) = \varepsilon_h \psi_h(\mathbf{r}_h), \quad (3.4)$$

gdzie

$$\hat{\mathcal{H}}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 + \mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e), \quad (3.5)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h}\nabla_h^2 + \mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h), \quad (3.6)$$

gdzie z kolei

$$\mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e) = V_e(\mathbf{r}_e) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_h, \quad (3.7)$$

$$\mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h) = V_h(\mathbf{r}_h) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e. \quad (3.8)$$

W równaniach (3.3) i (3.4)  $\varepsilon_e$  i  $\varepsilon_h$  są parametrami wariacyjnymi pełniącymi rolę jednocząstkowych energii własnych. Funkcja falowa układu utworzona z iloczynu rozwiązań tych równań jest z punktu widzenia metody wariacyjnej najlepszą funkcją próbną spośród wszystkich funkcji postaci (3.2).

Potencjały (3.7) i (3.8) składają się z sumy gołego potencjału pochodzącego od kropki kwantowej oraz członu opisującego pole kulombowskie, wywołane przez rozmyty ładunek drugiej cząstki. Potencjały te będziemy nazywać potencjałami Hartree, a hamiltoniany (3.5) i (3.6) hamiltonianami Hartree odpowiednio elektronu i dziury.

Do rozwiązywania nieliniowych równań całkowo-różniczkowych (3.3) i (3.4) można użyć metody kolejnych przybliżeń. Zakładamy pewną przybliżoną funkcję falową elektronu, obliczamy potencjał Hartree dziury i z równania (3.4) wyznaczamy funkcję falową dziury. Mając funkcję falową dziury wyliczamy potencjał Hartree elektronu i z równania (3.3) wyznaczamy funkcję falową elektronu. Proces ten powtarzamy aż do osiągnięcia wewnętrznej zgodności funkcji falowych i potencjałów z dużą dokładnością.

Całkowita energia ekscytonu odpowiadająca funkcji falowej (3.2) dana jest w przybliżeniu Hartree przez

$$E = \varepsilon_e + \varepsilon_h - V_C, \quad (3.9)$$

gdzie

$$V_C = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \iint \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2 |\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h. \quad (3.10)$$

Energia oddziaływania kulombowskiego jest liczona w równaniach (3.3) i (3.4) dwa razy. Z tego względu musi ona zostać odjęta w wyrażeniu (3.9) na energię ekscytonu.

Różnica pomiędzy energią  $E$ , a sumą energii jednocząstkowych ma prostą interpretację fizyczną. Mianowicie energia  $E$  jest energią potrzebną do oderwania najpierw jednej cząstki z kropki kwantowej, a następnie oderwania drugiej, pod nieobecność tej pierwszej. Suma energii jednocząstkowych natomiast jest sumą energii potrzebnych do oderwania każdej z cząstek w obecności pozostałej.

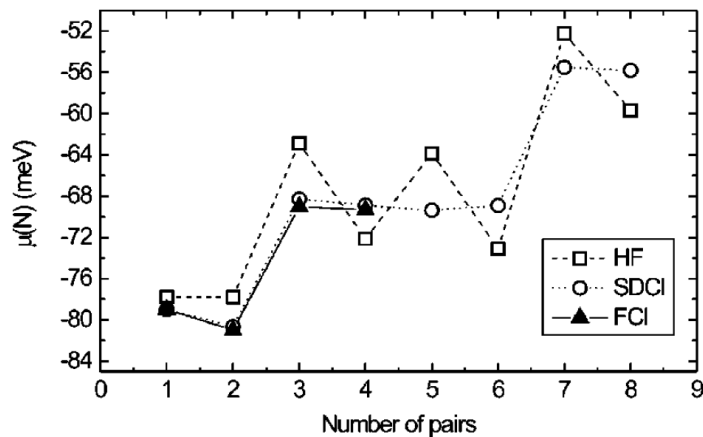
Ponadto należy zwrócić uwagę na fakt, że w układzie oddziałujących cząstek nie jest możliwe jednoznaczne określenie energii jednocząstkowych. Można w sposób zupełnie dowolny odjąć pewną ilość energii od energii jednej z cząstek i dodać taką samą jej ilość do energii drugiej cząstki, zachowując przy tym nie zmienioną energię całego układu (która stanowi jedyny bezpośredni kontakt z eksperymentem). Z tego względu nie można uważać energii  $\varepsilon_i$  za energie jednocząstkowe.

Dodatkowo musimy zaznaczyć, że wybierając funkcję falową w postaci iloczynu funkcji jednocząstkowych nie uwzględniamy zakazu Pauliego, którego wprowadzenie jest konieczne w przypadku gdy mamy do czynienia z nieodróżnialnymi fermionami takimi jak np. elektrony. Zakaz ten wprowadza się poprzez antysymetryzację funkcji falowej (za pomocą wyznacznika Slatera), a przybliżenie, które go uwzględnia jest nazywane *przybliżeniem Hartree-Focka*. W naszym przypadku jednak, ponieważ mamy do czynienia z ekscytonem, czyli parą elektron-dziura, nie bierzemy pod uwagę zakazu Pauliego. Z tego też względu nie pojawia się we wzorze (3.9) człon opisujący *energię wymiany*, czyli energię mającą swoje źródło w oddziaływaniu kulombowskim, a która związana jest z korelacją ruchu nieodróżnialnych fermionów będącą konsekwencją antysymetryczności ich funkcji falowej.

Wybierając funkcję próbną w postaci (3.2) pomijamy jeszcze jeden ważny efekt. Mianowicie zakładając, że cząstki poruszają się niezależnie od siebie zaniedbujemy korelacje pomiędzy ich położeniami. Jest to efekt występujący zarówno dla cząstek odróżnialnych jak i nieodróżnialnych, a będący jedynie konsekwencją wyboru funkcji falowej układu cząstek oddziałujących w postaci iloczynu funkcji jednocząstkowych. Wkład do energii układu związany z korelacją ruchu cząstek nazywa się *energią korelacji*. Jest to różnica pomiędzy dokładną energią układu, a energią obliczoną w przybliżeniu Hartree (dla cząstek odróżnialnych), lub energią obliczoną w przybliżeniu Hartree-Focka (dla fermionów nieodróżnialnych).

Wkład energii korelacji do energii całkowitej w samorosnących kropkach kwantowych dla pojedynczej pary elektron-dziura, został oszacowany w pracy [70] na mniej niż 2% (porównaj rysunek 3.1).

Podsumowując, zapożyczone z fizyki atomowej przybliżenie Hartree może stanowić efektywne narzędzie do wyznaczenia energii ekscytonu związanego przez kropkę kwantową, przy czym błąd jaki popełniamy jest w tym przy-



Rysunek 3.1: Energia dodania/usunięcia pary elektron-dziura zdefiniowana jako  $\mu(N) = E_g(N) - E_g(N-1)$ , gdzie  $E_g$  oznacza energię stanu podstawowego, w zależności od liczby par elektron-dziura w kropce kwantowej. Energie wyliczone zostały metodami Hartree-Focka (kwadraty) oraz (pełną) Metodą Oddziaływania Konfiguracji (trójkąty). Energia korelacji dla pojedynczej pary elektron-dziura została oszacowana (według wzoru  $E_{korel} = E_{FCI} - E_{HF}$ ) na mniej niż 2% (za: [70]).

padku niewielki i wynika tylko z zaniedbania energii korelacji.



# Rozdział 4

## Metody numeryczne rozwiązywania układu równań Hartree

W niniejszym rozdziale opiszemy metody numeryczne służące do rozwiązywania układu równań Hartree (3.3) i (3.4) dla ekscytonu związanego przez kołowo symetryczny potencjał dwuwymiarowej kropki kwantowej.

Zastosowana przez nas procedura rozwiązywania tego układu wygląda następująco. Najpierw, przy założeniu braku oddziaływania z dziurą, znajdujemy funkcję falową elektronu w kropce kwantowej w zerowym rzędzie rachunku Hartree. Następnie, korzystając z wyznaczonej funkcji falowej elektronu, wyliczamy całkę Hartree dziury. W kolejnym kroku znajdujemy funkcję falową dziury, w potencjale pochodzącym od kropki oraz od elektronu (całka Hartree dziury). Korzystając z tej funkcji wyliczamy całkę Hartree elektronu i, w następnym kroku, wyznaczamy funkcję falową elektronu, tym razem w pierwszym rzędzie rachunku Hartree. Opisaną procedurę powtarzamy, aż do osiągnięcia wewnętrznej zgodności potencjałów, czyli momentu, w którym wartości własne przestają się zmieniać w kolejnych krokach Hartree (z żadaną dokładnością).

Równania Hartree rozwiązywać będziemy na siatce (podrozdziały 4.2–4.4), a całkę Hartree wyliczamy przy użyciu metody opisanej w podrozdziale (4.5). Aby rozpocząć musimy najpierw sprowadzić równania Hartree (3.3) i (3.3) do postaci bezwymiarowej, czemu poświęcony został kolejny paragraf.

## 4.1 Sprowadzenie równań Hartree do postaci bezwymiarowej

Rozpisując laplasjan we współrzędnych biegunowych możemy równanie Hartree dla jednej z cząstek zapisać w postaci

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \mathcal{U}(\rho, \varphi) \right\} \psi(\rho, \varphi) = \varepsilon \psi(\rho, \varphi). \quad (4.1)$$

Jeżeli układ posiada symetrię cylindryczną, tzn.  $V = V(\rho)$ , wtedy  $\mathcal{U} = \mathcal{U}(\rho)$  i funkcję falową cząstki możemy przedstawić w postaci iloczynu

$$\psi(\rho, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \phi(\rho), \quad l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (4.2)$$

gdzie  $l$  to orbitalny moment pędu cząstki, który ze względu na fakt, że cząstka przebywa w płaszczyźnie x-y, jest skierowany prostopadle do tej płaszczyzny, czyli w kierunku z. Podstawiając powyższą funkcję do równania (4.1), otrzymujemy równanie na funkcję radialną

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{l^2}{\rho^2} \right] + \mathcal{U}(\rho) \right\} \phi(\rho) = \varepsilon \phi(\rho). \quad (4.3)$$

Sprowadzimy teraz równanie (4.3) do postaci bezwymiarowej. Oznaczając

$$U(\rho) \equiv \mathcal{U}(\rho) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l^2}{\rho^2}, \quad (4.4)$$

możemy napisać

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + U(\rho) \right\} \phi(\rho) = \varepsilon \phi(\rho). \quad (4.5)$$

Korzystając z długości charakterystycznej  $\lambda_0$ , zdefiniowanej za pomocą wzoru (1.3), wprowadzamy współrzędną bezwymiarową

$$\varrho = \frac{\rho}{\lambda_0}.$$

Za jednostkę energii przyjmujemy  $\hbar\omega_0$  (energię związaną wzorem (1.3) z długością charakterystyczną) i oznaczamy

$$E = \frac{\varepsilon}{\hbar\omega_0}, \quad U = \frac{U}{\hbar\omega_0}.$$

Teraz równanie (4.5) przejdzie w<sup>1</sup>

$$\left\{ -\frac{1}{2\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \varrho \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) + U(\varrho) \right\} \phi(\varrho) = E\phi(\varrho). \quad (4.6)$$

## 4.2 Dyskretyzacja równań Hartree

Równanie (4.6) rozwiązywać będziemy na siatce  $\varrho_j$ . Oznaczając

$$\varrho \frac{\partial \phi}{\partial \varrho} \equiv f$$

możemy zapisać w punktach siatki  $j + \frac{1}{2}$  oraz  $j - \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} f_{j+\frac{1}{2}} &= \varrho_{j+\frac{1}{2}} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\varrho_{j+1} - \varrho_j}, \\ f_{j-\frac{1}{2}} &= \varrho_{j-\frac{1}{2}} \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}}, \end{aligned}$$

wtedy

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\varrho} \frac{\partial f}{\partial \varrho} \Big|_{\varrho=\varrho_j} &= -\frac{1}{2\varrho_j} \frac{f_{j+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+\frac{1}{2}} - \varrho_{j-\frac{1}{2}}} \\ &= -\frac{1}{2\varrho_j} \frac{1}{\varrho_{j+\frac{1}{2}} - \varrho_{j-\frac{1}{2}}} \left[ \varrho_{j+\frac{1}{2}} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} - \varrho_{j-\frac{1}{2}} \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Definiując kwadrat wielkości  $h_j$

$$\varrho_j \left( \varrho_{j+\frac{1}{2}} - \varrho_{j-\frac{1}{2}} \right) = \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}^2 - \varrho_{j-\frac{1}{2}}^2}{2} \equiv h_j^2, \quad (4.8)$$

gdzie w pierwszej równości skorzystaliśmy z

$$\varrho_j = \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}} + \varrho_{j-\frac{1}{2}}}{2},$$

możemy zapisać (4.7) w postaci

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left[ \left( \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) \phi_{j-1} - \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} + \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) \phi_j + \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) \phi_{j+1} \right].$$

<sup>1</sup> Ściśle rzecz biorąc będziemy mieli  $\phi(\rho) = \phi(\lambda_0 \varrho)$ . Jednak dla prostoty oznaczeń pomijamy  $\lambda_0$ . Podobnie postępujemy w przypadku U.

Żeby uzyskać całą lewą stronę równania (4.6) należy jeszcze dodać do powyższego wyrażenia człon  $U(\varrho_j)\phi_j$ . Równanie (4.6) możemy teraz zapisać na siatce

$$\begin{array}{rcl} & & \vdots \\ \mathcal{H}_{j,j-1}\phi_{j-1} + \mathcal{H}_{j,j}\phi_j & + & \mathcal{H}_{j,j+1}\phi_{j+1} & = & E\phi_j \\ & & \mathcal{H}_{j+1,j}\phi_j + \mathcal{H}_{j+1,j+1}\phi_{j+1} + \mathcal{H}_{j+1,j+2}\phi_{j+2} & = & E\phi_{j+1} \\ & & & & \vdots \end{array}$$

lub w skróconej formie

$$\sum_j \mathcal{H}_{i,j}\phi_j = E\phi_i, \quad (4.9)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{j,j-1} &= -\frac{1}{2h_j^2} \left( \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right), & j &= i-1, \\ \mathcal{H}_{j,j} &= +\frac{1}{2h_j^2} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} + \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) + U(\varrho_j), & j &= i, \\ \mathcal{H}_{j,j+1} &= -\frac{1}{2h_j^2} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right), & j &= i+1, \end{aligned}$$

a w pozostałych przypadkach  $\mathcal{H}_{i,j} = 0$ .

Żeby otrzymać macierz symetryczną ( $\mathcal{H}'_{j,j+1} = \mathcal{H}'_{j+1,j}$ ) wprowadzamy

$$\xi_j \equiv h_j\phi_j, \quad (4.10)$$

gdzie  $h_j$  jest zdefiniowane za pomocą wzoru (4.8). Teraz równanie (4.9) przechodzi w

$$\sum_j \mathcal{H}_{i,j} \frac{h_i}{h_j} \xi_j = E\xi_i \quad (4.11)$$

i oznaczając

$$\mathcal{H}'_{i,j} \equiv \mathcal{H}_{i,j} \frac{h_i}{h_j}$$

dostajemy

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_{j,j+1} &= \mathcal{H}_{j,j+1} \frac{h_j}{h_{j+1}} = -\frac{1}{2h_j^2} \frac{h_j}{h_{j+1}} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j h_{j+1}} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) \\ \mathcal{H}'_{j+1,j} &= \mathcal{H}_{j+1,j} \frac{h_{j+1}}{h_j} = -\frac{1}{2h_{j+1}^2} \frac{h_{j+1}}{h_j} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_{j+1} h_j} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) \end{aligned}$$

a więc  $\mathcal{H}'_{j,j+1} = \mathcal{H}'_{j+1,j}$  czyli jest to symetryczna macierz trójdiagonalna. Równanie (4.11) w jawnej postaci będzie teraz wyglądało następująco

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2h_j h_{j-1}} \left( \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) \xi_{j-1} \\ + & \left[ \frac{1}{2h_j^2} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} + \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) + \mathbf{U}(\varrho_j) \right] \xi_j \\ & -\frac{1}{2h_j h_{j+1}} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) \xi_{j+1} = \mathbf{E} \xi_j. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Mając daną symetryczną macierz trójdiagonalną możemy znaleźć wartości własne np. za pomocą metody Martina-Deana, a wektory własne przy użyciu metody DWSZ.

Przedstawiona metoda dyskretyzacji równania Schrödingera, a następnie sprowadzenia zagadnienia algebraicznego do postaci symetrycznej macierzy trójdiagonalnej zaadaptowana została z pracy [71]. Jej kluczowym punktem jest przekształcenie (4.10) — we współrzędnych biegunowych wyliczona przez nas macierz nie jest symetryczna ponieważ wektory nie są z przestrzeni Hilberta i dopiero pomnożenie ich przez  $h_i = \sqrt{x_i}$  prowadzi do dobrej definicji wektorów zgodnej z iloczynem skalarnym (i normowaniem z  $\rho d\rho$ ). Macierz jest wtedy macierzą rzeczywistą symetryczną i może być zdiagonalizowana.

### 4.3 Wyznaczanie wartości własnych

Liczba wartości własnych trójdiagonalnej, symetrycznej macierzy o wymiarze  $n \times n$  mniejszych od danej liczby  $z$  równa jest liczbie ujemnych wyrazów ciągu liczbowego [44, 72]

$$\begin{aligned} u_0 &= d_0 - z, \\ u_i &= d_i - z - \frac{e_{i-1}^2}{u_{i-1}}, \quad (i = 1, 2, \dots, n-1), \end{aligned} \quad (4.13)$$

gdzie  $d_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n-1$ ) to kolejne elementy stojące na diagonalu macierzy, natomiast  $e_i$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n-2$ ) to elementy stojące pod i nad diagonalą. Liczbę wartości własnych mniejszych od  $z$  oznaczamy będziemy przez  $l_z$ .

Algorytm Martina-Deana, wykorzystujący powyższy ciąg do znajdowania wartości własnej metodą bisekcji wygląda następująco:

Powtarzana procedura:

$$z = (z_p + z_k) / 2$$

Jeśli  $z_k - z_p \leq \sigma$  to  $\varepsilon_j = z$  Koniec

Jeśli  $l_z < j$  to  $z_p = z$ , jeśli nie, to  $z_k = z$

Liczbę  $l_z$  znajdujemy zliczając dla każdego  $z$  wyrazy ciągu (4.13) mniejsze od zera,

$\varepsilon_j$  - szukana  $j$ -a wartość własna,

$(z_p, z_k)$  - oszacowanie przedziału zawierającego  $m$  najniższych wartości własnych ( $m \geq j$ )

$\sigma$  - dokładność.

W naszym przypadku (macierz  $\mathbf{H}'$ ) elementy diagonalne i pozadiagonalne są równe odpowiednio

$$d_j = \frac{1}{2h_j^2} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} + \frac{\varrho_{j-\frac{1}{2}}}{\varrho_j - \varrho_{j-1}} \right) + \mathbf{U}(\varrho_j) \quad (j = 0, 1, \dots, n-1),$$

$$e_j = -\frac{1}{2h_j h_{j+1}} \left( \frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}}{\varrho_{j+1} - \varrho_j} \right) \quad (j = 0, 1, \dots, n-2),$$

a  $h_j$  zgodnie z definicją (4.8) wynosi

$$h_j = \sqrt{\frac{\varrho_{j+\frac{1}{2}}^2 - \varrho_{j-\frac{1}{2}}^2}{2}} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1).$$

## 4.4 Wyznaczanie wektorów własnych

Do wyznaczenia wektorów własnych trójdiagonalnej, symetrycznej macierzy o wymiarze  $n \times n$  użyjemy metody DWSZ [44, 73, 74].

Algorytm przedstawimy za pracą [44]. Przyjmując, że znaleziona wartość własna jest równa  $\varepsilon$  możemy zapisać zagadnienie własne w postaci

$$\begin{bmatrix} d_0 - \varepsilon & e_0 & & & \\ e_0 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & e_{n-2} & \\ & & e_{n-2} & d_{n-1} - \varepsilon & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{n-1} \end{bmatrix} = \mathbf{0}$$

lub równoważnie

$$\begin{bmatrix} d_0 - \varepsilon & e_0 & & & \\ e_0 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & e_{k-2} & \\ & & e_{k-2} & d_{k-1} - \varepsilon & \\ & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -e_{k-1}\phi_k \end{bmatrix},$$

$$e_{k-1}\phi_{k-1} + (d_k + \varepsilon)\phi_k + e_k\phi_{k+1} = 0,$$

$$\begin{bmatrix} d_{k+1} - \varepsilon & e_{k+1} & & & \\ e_{k+1} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & e_{n-2} & \\ & & e_{n-2} & d_{n-1} - \varepsilon & \\ & & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{k+1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -e_k\phi_k \\ 0 \\ \cdot \\ \cdot \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Definiujemy ciągi

$$\Omega_1^- = (d_1 - \varepsilon)^{-1}, \quad \Omega_i^- = (d_i - \varepsilon - e_{i-1}^2 \Omega_{i-1}^-)^{-1}, \quad (i = 2, \dots, n-1),$$

$$\Omega_n^+ = (d_n - \varepsilon)^{-1}, \quad \Omega_i^+ = (d_i - \varepsilon - e_i^2 \Omega_{i+1}^+)^{-1}, \quad (i = n-1, \dots, 2),$$

za pomocą których możemy zapisać zagadnienie własne na dwa sposoby

$$\begin{array}{ll} \phi_2 = -e_1 \Omega_2^+ \phi_1 & \phi_{n-2} = -e_{n-2} \Omega_{n-2}^- \phi_{n-1} \\ \vdots & \vdots \\ \phi_k = -e_{k-1} \Omega_k^+ \phi_{k-1} & \phi_k = -e_k \Omega_k^- \phi_{k+1} \\ \hline \phi_{k+1} = -e_k \Omega_{k+1}^+ \phi_k & \phi_{k-1} = -e_{k-1} \Omega_{k-1}^- \phi_k \\ \vdots & \vdots \\ \phi_{n-1} = -e_{n-2} \Omega_{n-1}^+ \phi_{n-2} & \phi_1 = -e_1 \Omega_1^- \phi_2 \end{array}$$

Następnie znajdujemy  $j$ , dla którego

$$\begin{aligned} r_j &= |e_{j-1}\phi_{j-1} + (d_j - \varepsilon)\phi_j + e_j\phi_{j+1}| \\ &= |-e_{j-1}^2 \Omega_{j-1}^- + (d_j - \varepsilon) - e_j^2 \Omega_{j+1}^+| |\phi_j| \end{aligned} \quad (4.14)$$

osiąga minimum. Oznaczamy ten znaleziony wskaźnik przez  $k$ . Przyjmujemy  $\phi_k = 1$  i wykorzystując wzory znajdujące się pod poziomymi kreskami w opisie naszego zagadnienia własnego, wyznaczamy wektor własny

$$\begin{aligned} \phi_i &= -e_{i-1} \Omega_i^+ \phi_{i-1}, & (i = k+1, \dots, n-1), \\ \phi_i &= -e_i \Omega_i^- \phi_{i+1}, & (i = k-1, \dots, 0). \end{aligned}$$

Jeśli  $r_k$  jest mniejsze niż zakładana przez nas dokładność, przyjmujemy, że wektor własny został wyznaczony prawidłowo.

Dla naszych celów zmodyfikujemy część związaną z wybieraniem punktu początkowego. Mianowicie zamiast szukać wskaźnika, dla którego  $r_j$ , zdefiniowane wzorem (4.14), osiąga minimum, znajdujemy wskaźnik, dla którego minimum osiąga  $\tilde{r}_j = r_j/|\phi_j|$ . Z (4.14) znajdujemy

$$\tilde{r}_j = \left| -e_{j-1}^2 \Omega_{j-1}^- + d_j - \varepsilon - e_j^2 \Omega_{j+1}^+ \right|.$$

Jeśli znajdziemy już wskaźnik  $k$ , dla którego  $\tilde{r}_j$  osiąga minimum, tak jak poprzednio sprawdzamy, czy  $r_k$ , dane wzorem (4.14), jest mniejsze od wymaganej dokładności. Praktyka pokazuje, że jest to efektywny sposób wyznaczania wskaźnika  $k$ .

W naszym przypadku należy jeszcze pamiętać, że otrzymane wektory własne to w rzeczywistości wektory  $\xi$ . Korzystając z definicji (4.10) znajdujemy właściwy wektor falowy, którego składowe równe są  $\phi_j = \xi_j/h_j$ .

## 4.5 Numeryczne obliczanie całki Hartree

W dalszej części opiszemy numeryczną metodę obliczania całki Hartree zaczerpniętą z artykułu [75]. Jeśli  $|\psi(\mathbf{r})|$  posiada symetrię kołową, wprowadzamy oznaczenie

$$f(\rho) \equiv |\psi(\mathbf{r})|^2$$

i całkę Hartree możemy zapisać w następujący sposób (zobacz dodatek A)

$$\int \frac{f(\rho)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} = \int_0^\infty \frac{4\rho f(\rho)}{\rho + \rho'} K \left( \frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2} \right) d\rho, \quad (4.15)$$

gdzie  $K$  to zupełna całka eliptyczna pierwszego rodzaju. Do obliczeń numerycznych użyjemy następującej aproksymacji funkcji  $K$  zaczerpniętej z [76]

$$K(x) = (a_0 + a_1 x' + a_2 x'^2) - (b_0 + b_1 x' + b_2 x'^2) \ln x', \quad (4.16)$$

gdzie  $x' = 1 - x$  oraz

$$\begin{aligned} a_0 &= 1.3862944, \\ a_1 &= 0.1119723, \\ a_2 &= 0.0725296, \\ b_0 &= 0.5, \\ b_1 &= 0.1212478, \\ b_2 &= 0.0288729. \end{aligned}$$



Ponieważ pod całką w (4.15) pojawia się logarytm musimy zastosować specjalną metodę całkowania np. metodę logarytmicznie ważonych kwadratur (ang. *Logarithmically weighted method*). Korzystając z (4.16) wyrażenie (4.15) może zostać zapisane w postaci

$$I(\rho') = \int_0^\infty \left[ G(\rho) + F(\rho) \ln \frac{(\rho - \rho')^2}{(\rho + \rho')^2} \right] d\rho, \quad (4.17)$$

gdzie

$$G(\rho) = + \left( a_0 + a_1 x' + a_2 x'^2 \right) \frac{4\rho f(\rho)}{\rho + \rho'},$$

$$F(\rho) = - \left( b_0 + b_1 x' + b_2 x'^2 \right) \frac{4\rho f(\rho)}{\rho + \rho'},$$

gdzie z kolei (zobacz (4.15) i (4.16))

$$x'(\rho) = 1 - x(\rho) = 1 - \frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2}.$$

Jeśli wprowadzimy krok dyskretyzacji  $s$  oraz liczbę kroków oznaczmy przez  $N$ , to równanie (4.17) przybierze postać

$$I(\rho') = \sum_{i=0}^{N-1} \int_0^s \left\{ G(\rho + is) + F(\rho + is) \ln \frac{[\rho - (\rho' - is)]^2}{[\rho + (\rho' + is)]^2} \right\} d\rho. \quad (4.18)$$

Jeśli teraz zastąpimy  $F(\rho + is) \equiv F_i$  przez  $F_i + (F_{i+1} - F_i)(\rho/s)$  (i analogicznie postąpimy z  $G_i$ ) oraz wyciąkujemy po  $\rho$ , to równanie (4.18) przejdzie w

$$I(\rho') = \sum_{i=0}^{N-1} \left[ (G_{i+1} + G_i) \frac{s}{2} + F_i A_i(\rho') + (F_{i+1} - F_i) C_i(\rho') \right],$$

gdzie

$$A_i(\rho') = a [s - (\rho' - is)] - a [s + (\rho' + is)],$$

$$C_i(\rho') = \frac{1}{s} \{ c [s - (\rho' - is)] - c [s + (\rho' + is)] \} - 2\rho',$$

gdzie z kolei

$$a(y) = 2y \ln |y| + 2(s - y) \ln |s - y|,$$

$$c(y) = y(2s - y) \ln |y| + (s - y)^2 \ln |s - y|.$$

## 4.6 Uwagi do procedury obliczeniowej

Całą procedurę rozwiązywania układu równań Hartree, jak o tym wspominaliśmy w rozdziale 3, powtarzamy aż do osiągnięcia wewnętrznej zgodności potencjałów z dużą dokładnością. W praktyce często już po dwóch krokach rachunku Hartree (dwa razy rozwiązujemy cały układ) energie Hartree elektronu i dziury przestają się zmieniać. Wyjątek, w przypadku kropek kwantowych, stanowią szczególne wartości rozmiaru kropki, dla których następuje przejście jednego z nośników z centrum kropki do pierścienia wokół niej (rozdziały 5 i 6). Dla takich rozmiarów kropki, żeby osiągnąć wewnętrzną zgodność potencjałów Hartree potrzeba większej liczby kroków — od kilku do kilkunastu, a w szczególnych przypadkach nawet kilkudziesięciu. Większej liczby kroków potrzeba też dla małych kropek, dla których energia kulombowska w ekscytocie jest dominująca.

Kolejnym problemem jest ustalenie liczby kroków na siatce, na której rozwiązujemy nasze równania, a także wielkości samego kroku. Aby rozstrzygnąć jaka liczba i wielkość kroków jest odpowiednia postępujemy następująco. Dla ustalonej wielkości i liczby kroków liczymy wartości i wektory własne, po czym w pierwszym przypadku sprawdzamy czy wartości własne zmieniają się po zmniejszeniu kroku i jednoczesnym odpowiednim zwiększeniu liczby kroków tak, aby rozmiar siatki pozostał taki sam (sprawdzamy w ten sposób, czy wielkość kroku jest odpowiednia), w drugim przypadku zwiększamy liczbę kroków i sprawdzamy, czy wartości i wektory własne pozostają takie same (innymi słowy sprawdzamy, czy siatka jest odpowiednio duża).

Zwykle, nawet dla bardzo dużych kropek kwantowych, wystarczy kilkaset kroków na siatce (nawet dla wyższych stanów wzbudzonych) z odpowiednio dobranym krokiem, aby wartości i wektory własne przestały się zmieniać. Z wyjątkiem od tej reguły będziemy mieli do czynienia w rozdziale 8, w którym analizujemy potencjał zjonizowanego donora oddalonego od płaszczyzny studni, który przypomina potencjał kropki drugiego rodzaju. Jako iż potencjał donora nie dąży tak szybko do zera, jak potencjał kropki niezbędne jest zwiększanie liczby kroków na siatce wraz z przesuwaniem donora w stronę studni, w której znajdują się nośniki ładunku tworzące ekscyton. (oprócz tego niezbędne jest również zmniejszanie kroku, tak, aby uwzględnić dokładnie zmianę potencjału donora na małych odległościach).

## Rozdział 5

# Stany ekscytonowe w kropkach kwantowych drugiego rodzaju

W rozdziale tym zajmować się będziemy stanami ekscytonowymi w kropkach kwantowych drugiego rodzaju pod nieobecność pól elektrycznego i magnetycznego. Przeanalizujemy zależność energii ekscytonu od rozmiarów kropki kwantowej, a także od kształtu jej potencjału (rozważymy potencjał gaussowski oraz potencjał schodkowy).

Kropka kwantowa drugiego rodzaju, którą będziemy się zajmować przyciąga elektrony, odpychając jednocześnie dziury. Z tego względu potencjał kropki dla elektronu będzie potencjałem przyciągającym, podczas gdy dla dziury będzie on stanowił barierę

### 5.1 Przybliżone liczby kwantowe

Energia ekscytonu w przybliżeniu Hartree dana jest przez (3.9). W celu wyznaczenia energii Hartree elektronu i dziury, w kołowo symetrycznym potencjale kropki, rozwiązujemy dwa samouzgodnione równania postaci (4.3), z potencjałami odpowiednio (3.7) i (3.8), masami efektywnymi  $m_e$  i  $m_h$  i momentami pędu  $l_e$  i  $l_h$ . Ponieważ układ posiada symetrię cylindryczną zachowany będzie całkowity moment pędu układu, który, ze względu na ograniczenie ruchu nośników w płaszczyźnie x-y, będzie zwrócony w kierunku z. Wynika z tego, że tylko całkowity moment pędu  $L = l_e + l_h$  jest dobrą liczbą kwantową. W naszym przybliżeniu będziemy więc traktowali  $l_e$  i  $l_h$  jako przybliżone liczby kwantowe. To samo dotyczy się liczb kwantowych  $n_e$  i  $n_h$ , które teraz opiszemy.

Ponieważ nasze zagadnienia własne (4.3) są szczególną postacią zagadnienia Sturm-Liouville'a, wobec tego stosuje się do nich tzw. *twierdzenie*

oscylacyjne [77, 54] mówiące, że  $k$ -ty wektor własny ma dokładnie  $k - 1$  punktów węzłowych. W naszym przypadku funkcja własna  $\phi^{(n)}(\rho)$  (zarówno elektronu jak i dziury) przecina oś  $\rho$  dokładnie  $n - 1$  razy, a przybliżone liczby kwantowe  $n_e$  i  $n_h$  przybierają wartości dodatnie i całkowite.

Używając przybliżonych liczb kwantowych  $l_e$ ,  $l_h$ ,  $n_e$  i  $n_h$  będziemy więc mogli uporządkować rozwiązania naszego zagadnienia. W tym celu jednak potrzebujemy konkretnej postaci potencjału kropki.

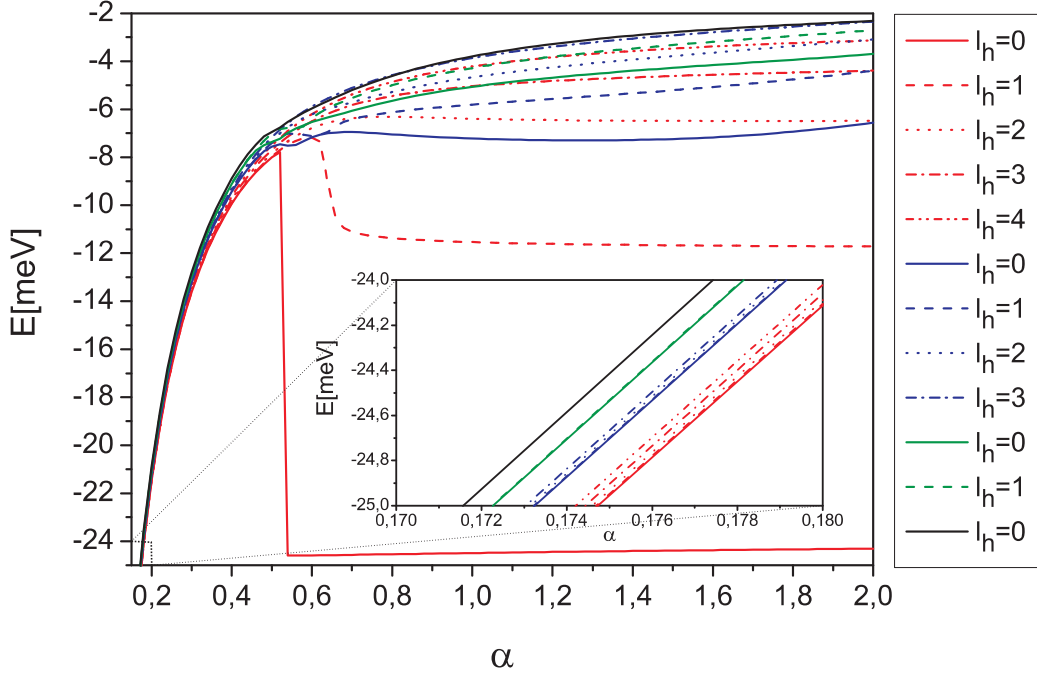
## 5.2 Ekscyton w gaussowskiej kropce kwantowej

Jak to opisano w podrozdziale 1.4 do modelowania stosunkowo niewielkich kropek kwantowych (szczególnie tych zadawanych polem elektrycznym) doskonale nadaje się potencjał gaussowski (wzór (1.1) i rysunek 1.4). Pozwala on na uwzględnienie efektów brzegowych w niewielkich kropkach kwantowych, a także umożliwia opis ekscytonu wychodząc z zasad pierwszych. Z tego też względu wykorzystamy go do opisu ekscytonu w kropce kwantowej drugiego rodzaju.

W dalszej części opiszemy kropkę gaussowską, której potencjał dla elektronu i dziury różni się tylko znakiem. Dla dziury jest on potencjałem odpychającym, dla elektronu natomiast — przyciągającym. Dla naszych potrzeb przyjmiemy, że kropka ta została zadana polem elektrycznym w dwuwymiarowej studni wykonanej z GaAs. W takim przypadku względna stała dielektryczna materiału studni wynosi  $\epsilon = 12,4$ , a masy efektywne elektronu i ciężkiej dziury wynoszą odpowiednio  $m_e/m_0 = 0,067$  i  $m_h/m_0 = 0,45$  (bierzemy pod uwagę tylko ciężkie dziury ponieważ wnoszą one największy wkład do widma fotoluminescencji GaAs, jednak bardziej realistyczny model powinien również brać pod uwagę dziury lekkie, a także mieszanie podpasm).

Rysunek 5.1 przedstawia kilka spośród najniższych energii ekscytonu w zależności od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar (wzory (1.4) i (1.5)) gaussowskiej kropki drugiego rodzaju, której krzywizna  $\hbar\omega_0 = 5$  meV. Kolorem czerwonym oznaczone są energie dla  $n_h = 1$ , niebieskim dla  $n_h = 2$ , zielonym dla  $n_h = 3$ , czarnym  $n_h = 4$ . Dla wszystkich tych energii przybliżone liczby kwantowe elektronu wynoszą  $n_e = 1$  oraz  $l_e = 0$ . Stany o  $l_h > 0$  (a także  $l_e > 0$ ) są zdegenerowane — tę samą energię posiadają stany o  $l_h = k$  i  $l_h = -k$ , ale dla prostoty oznaczać je będziemy tylko modułem wartości  $k$ . Degeneracja ta zniknie po włączeniu pola magnetycznego (rozdział 6).

Wkładka rysunku 5.1 pokazuje te same energie, dla małych wartości parametru  $\alpha$  (duże kropki). Widać, że kolejność poziomów zmienia się wraz z  $\alpha$ .



Rysunek 5.1: Energie ekscytonu w zależności od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar gaussowskiej kropki kwantowej drugiego rodzaju. Dla koloru czerwonego  $n_h = 1$ , dla niebieskiego  $n_h = 2$ , dla zielonego  $n_h = 3$ , dla czarnego  $n_h = 4$ . Dla wszystkich energii  $n_e = 1$  oraz  $l_e = 0$ . Krzywizna kropki to  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, a względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12,4$ .

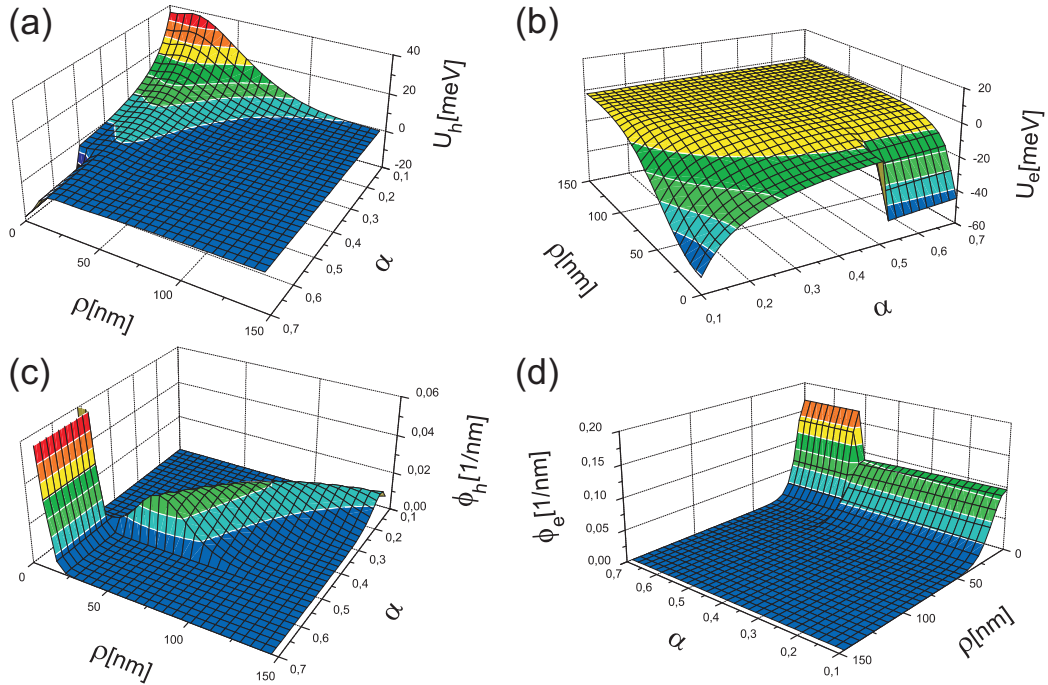
Zachowują ją jednak względem siebie poziomy o różnym  $n_h$  i ustalonym  $l_h$  (np. poziomy z  $l_h = 0$  są coraz wyższe w miarę jak rośnie  $n_h$  i ich kolejność dla wszystkich wartości parametru  $\alpha$  pozostaje niezmienną), a także poziomy o ustalonym  $n_h$  i rosnącym  $l_h$ . Stany o  $n_h = 1$  i wyższych  $l_h$ , dla dużych kropek leżące najbliżej stanu podstawowego (wkładka rysunku 5.1) zaczynają się przenikać ze stanami o wyższych  $n_h$  po przekroczeniu krytycznego rozmiaru kropki  $\sim 0,5$ . Dodatkowo przy przekraczaniu tej krytycznej wartości parametru  $\alpha$  energia stanu podstawowego ekscytonu drastycznie maleje. Jest to spowodowane tym, że w miarę wzrostu parametru  $\alpha$  kropka maleje do takiego rozmiaru, że potencjał Hartree dziury (rysunek 5.2a) przestaje być w centrum potencjałem odpychającym (zaczyna przeważać przyciąganie kulombowskie elektronu opisywane całą Hartree) i dziura, która dla większych kropek znajduje się w pierścieniu, może przeskoczyć do środka układu. Przeskok ten odbywa się dopiero wtedy, gdy minimum potencjału Hartree jest na tyle głębokie, że dziura w nim zlokalizowana będzie charakteryzowała się niższą energią w porównaniu do dziury znajdującej się w pierścieniu.

Dla  $\alpha > 0,5$  typowa dla kropek kwantowych drugiego rodzaju struktura ekscytonu, w którym dziura zlokalizowana jest w pierścieniu dookoła kropki, a elektron w centrum (lub odwrotnie w przypadku kropek o przeciwnym układzie pasm), przestaje istnieć i kropka kwantowa zaczyna przypominać kropkę pierwszego rodzaju z elektronem i dziurą zlokalizowanymi (w stanie podstawowym ekscytonu) w centrum.

Dla  $\alpha = 2$  głębokość naszej kropki to tylko  $2,5 \text{ meV}$ , a jej charakterystyczna szerokość  $L \approx 15 \text{ nm}$ . Dla większych  $\alpha$  kropka jest jeszcze mniejsza. Nasuwa to pytanie jak mała musi być kropka, żeby nie mogła związać ekscytonu? Jak o tym pisaliśmy w podrozdziale 1.5 w dwóch wymiarach, nawet najmniejszy potencjał (który jest w całości przyciągający) posiada stan związany. Dlatego też w zerowym kroku procedury Hartree w którym znajdujemy energię elektronu w pustej kropce dostajemy zawsze  $\varepsilon_e < 0$  i możemy wyznaczać stany ekscytonu. Jako iż w rzeczywistości kropka posiada skończoną grubość, a w trzech wymiarach nawet w potencjale całkowicie przyciągającym nie zawsze musi istnieć stan związany, dwuwymiarowe przybliżenie może prowadzić do błędnych rezultatów w przypadku bardzo małych kropek kwantowych. Ponadto wyliczone za pomocą naszej procedury energie ekscytonu, które dla dużych  $\alpha$  (bardzo małe kropki) się stabilizują mogą być w rzeczywistości energiami swobodnego ekscytonu w studni. Należy też mieć na uwadze fakt, że zastosowane przez nas przybliżenie masy efektywnej wymaga, aby potencjał kropki słabo zmieniał się na odległości międzyatomowej (można się spodziewać, że założenie to jest spełnione dla kropek o rozmiarach kilkadziesiąt nanometrów, a także nieco mniejszych, których potencjał zmienia się płynnie, tak jak w przypadku analizowanej przez nas kropki gaussowskiej o stosunkowo małej krzywiznie). Nakłada to wyraźne ograniczenie na rozmiar kropki, którą możemy analizować za pomocą naszych metod.

Przypadek dużych kropek kwantowych jest prostszy do przeanalizowania — potencjał pochodzący od kropki gaussowskiej o małym  $\alpha$  maleje szybko do zera w przeciwieństwie do potencjału pochodzącego od elektronu (całka Hartree), który maleje znacznie wolniej wraz z  $\rho$ . Stąd, jeśli mamy do czynienia z dużą kropką, potencjał Hartree dziury będzie miał zawsze minimum w pierścieniu dookoła kropki. Minimum to będzie coraz płytsze dla coraz większych kropek, a energia Hartree dziury, w związku z malejącym oddziaływaniem kulombowskim, coraz bliższa zeru.

Rysunek 5.2 ilustruje zależność potencjałów Hartree i funkcji falowych elektronu i dziury, opisujących stan podstawowy ekscytonu, od parametru  $\alpha$ . W obliczeniach przyjęto stałą krzywiznę kropki wynoszącą  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ , i względną stałą dielektryczną materiału studni  $\epsilon = 12$ . Z rysunku 5.2a widać, że dla krytycznej wartości parametru  $\alpha$  wynoszącej  $\sim 0,5$  dla dziury bardziej korzystne energetycznie staje się przejście do centrum układu (ry-

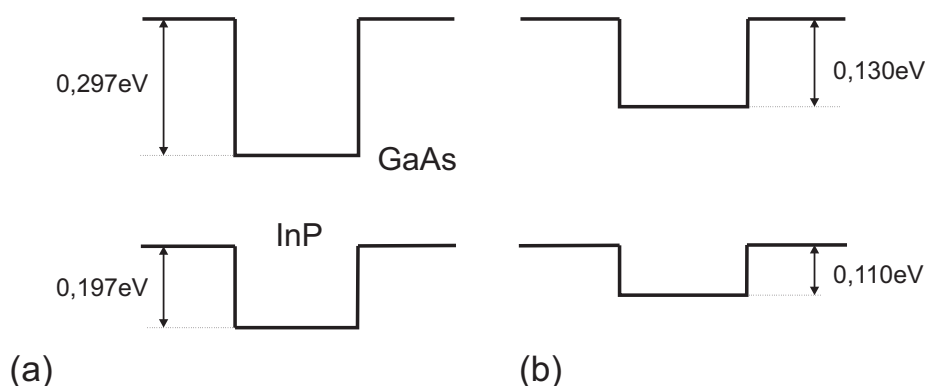


Rysunek 5.2: Potencjały Hartree dziury (a) i elektronu (b) i ich funkcje falowe (c) i (d) w zależności od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar gaussowskiej kropki kwantowej drugiego rodzaju. Krzywizna kropki to  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, a względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12$ .

sunek 5.2c), gdzie znajduje się elektron. Skutkiem zmiany funkcji falowej dziury jest zmiana potencjału Hartree elektronu (rysunek 5.2b), a co za tym idzie, zmiana funkcji falowej (rysunek 5.2d) i energii elektronu, która ulega wyraźnemu obniżeniu. Obniżenie to wynika ze zwiększenia się oddziaływania kulombowskiego między nośnikami, których funkcje falowe nakładają się w dużym stopniu po przejściu dziury do centrum.

### 5.3 Ekscyton w prostokątnej kropce kwantowej

Drugim potencjałem, którego użyjemy do modelowania kropek kwantowych drugiego rodzaju, będzie potencjał prostokątny, opisany w podrozdziale 1.4. Potencjał ten, podobnie jak potencjał gaussowski, umożliwi opis ekscytonu wychodząc z zasad pierwszych, a ponadto może być zastosowany do opisu małych kropek kwantowych, w których mamy do czynienia z niewielką

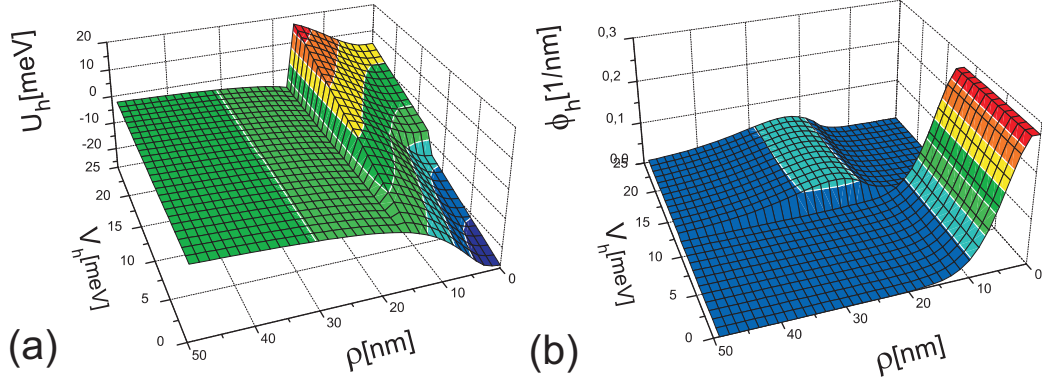


Rysunek 5.3: Układ pasm energetycznych InP/GaAs. Dla zrelaksowanej heterostruktury przesunięcia pasm (a) są większe niż w przypadku struktury poddanej naprężeniom (b).

liczbą stanów związanych. Ze względu na swój kształt bywa często używany do modelowania kropek trawionych o znacznych rozmiarach, a także, o czym wspominaliśmy w podrozdziale 1.4, do modelowania dużych kropek kwantowych zadawanych polem elektrycznym (porównaj rysunek 1.4b). W niniejszym rozdziale za względu na swój modelowy charakter potencjał ten posłuży nam do opisu samorosnących kropek kwantowych InP/GaAs. Ponieważ w dalszej części rozprawy, odnosić się będziemy do wyników eksperymentalnych dotyczących tych kropek (widma w polu magnetycznym) opiszemy pokrótce ich strukturę.

Przesunięcie energetyczne w paśmie przewodnictwa heterostruktury powstałej z połączenia InP i GaAs wynosi 297 meV natomiast w paśmie walencyjnym odpowiednie przesunięcie wynosi 197 meV [78] (rysunek 5.3a). Naprężenia ściskające w warstwach pseudomorficznym zmniejszają te przesunięcia do odpowiednio 130 meV i 110 meV [79] (rysunek 5.3b). Heterostruktura ta zachowuje jednak układ pasm charakterystyczny dla struktur drugiego rodzaju. Promień samorosnących kropek InP/GaAs, zmierzony za pomocą techniki AFM przez grupę Ribeiro [81], wynosi około 16 nm, a jej wysokość około 4 nm. Wysokość kropek InP/GaAs wytworzonych przez grupę de Godoya (pod nieco innymi warunkami) [82] oszacowana była na około 2 nm (kropki o promieniach około 26 nm). Biorąc pod uwagę tak duży stosunek średnicy do grubości kropki wydaje się być dobrym przybliżeniem modelowanie tych struktur jako dwuwymiarowych. Parametry materiałowe użyte w obliczeniach to  $m_e = 0,073$  — masa efektywna elektronu w InP,  $m_h = 0,45$  — masa efektywna ciężkiej dziury w GaAs,  $\epsilon = 12,665$  — średnia względna stała dielektryczna dla InP oraz GaAs (za [80]).

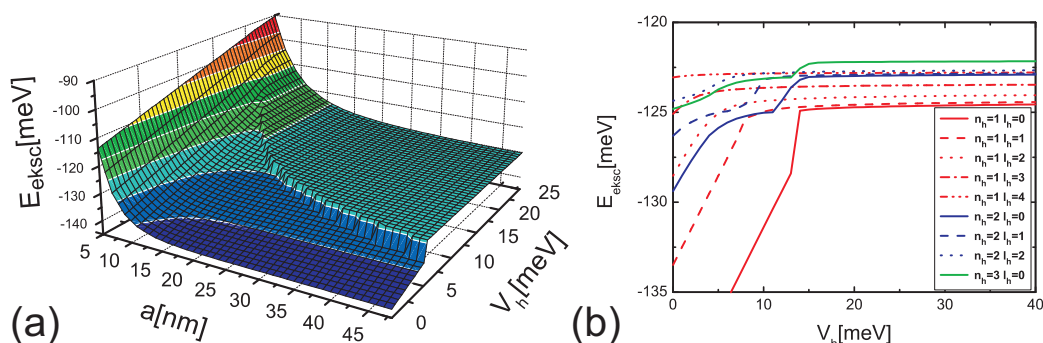




Rysunek 5.4: Potencjał Hartree (a) i funkcja falowa dziury (b), w zależności od wysokości bariery  $V_h$ . Parametry użyte w obliczeniach to  $m_e = 0,073$ ,  $m_h = 0,45$  i  $\epsilon = 12,665$ . Promień kropki to  $a = 16$  nm, a głębokość potencjału elektronu  $V_e = -130$  meV.

W stanie podstawowym, w kropce o opisanym powyżej strukturze, elektron znajduje się na dnie głębokiej ( $V_e = -130$  meV) studni kwantowej, podczas gdy dziura odpychana przez wysoką barierę potencjału ( $V_h = 110$  meV), jest jednocześnie przyciągana przez elektron, co powoduje utworzenie się minimum potencjału tuż za barierą. Rysunek 5.4 przedstawia potencjał Hartree oraz funkcję falową dziury jako funkcje zmieniającej się wysokości bariery  $V_h$  przy ustalonym  $V_e = -130$  meV oraz promieniu  $a = 16$  nm. Jak widać dla wartości  $V_h$  mniejszych od około 13 meV potencjał Hartree posiada minimum w centrum kropki i dziura (jej funkcja falowa) zlokalizowana jest w środku kropki, w tym samym miejscu, w którym znajduje się elektron. Należy tutaj zaznaczyć, że choć masa efektywna dziury ciężkiej użyta w obliczeniach wzięta została dla GaAs, a dziura znalazła się w centrum kropki, to ze względu na bardzo podobną wartość masy efektywnej dziury ciężkiej w InP (dla InP  $m_h = 0,45$  w temperaturze 4,4 K [80]) w dalszym ciągu rezultaty te mogą być z dużą dokładnością poprawne. Dla wartości  $V_h > 13$  meV dziura, w stanie podstawowym, znajduje się w pierścieniu dookoła kropki i jej funkcja falowa przekrywa się z funkcją falową elektronu tylko w niewielkim stopniu.

Przejście dziury z centrum do pierścienia dookoła kropki łączy się ze wzrostem energii zarówno elektronu, jak i dziury. Energia elektronu rośnie (staje się mniej ujemna) na skutek spadku oddziaływania kulombowskiego z dziurą, która opuszcza środkowe minimum. W takim samym stopniu maleje energia oddziaływania pomiędzy nośnikami. Decydującym czynnikiem w energii ekscytonu (3.9) zostaje więc energia dziury, która rośnie (staje się mniej ujemna) ze względu na powiększanie się bariery odpychającej. W konsekwencji ekscy-

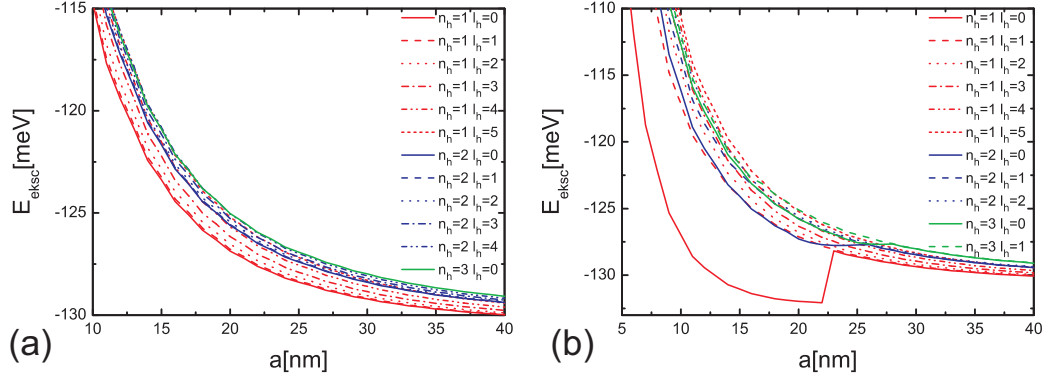


Rysunek 5.5: Rysunek (a): zależność energii stanu podstawowego ekscytynu od promienia kropki  $a$  oraz wysokości bariery dla dziury  $V_h$ . Rysunek (b): zależność kilku najniższych poziomów energetycznych ekscytynu od wysokości bariery dla dziury  $V_h$  przy ustalonym promieniu kropki ( $a = 16$  nm). Dla wszystkich poziomów z tego rysunku  $n_e = 1$  oraz  $l_e = 0$ . Stany z innymi wartościami tych dwóch liczb kwantowych są stanami o wyższych energiach (które nie zostały przedstawione na rysunku).

ton staje się słabiej związany.

Rysunek 5.5a przedstawia zależność energii stanu podstawowego ekscytynu od promienia kropki kwantowej  $a$  oraz wysokości bariery dla dziury  $V_h$ . Jak można zauważyć wysokość bariery  $V_h$ , przy której następuje przeskok dziury z pierścienia do centrum kropki, rośnie wraz z malejącym promieniem (na wykresie widoczny jest wyraźny skok energii dla wartości parametrów  $a$  oraz  $V_h$ , dla których dziura przechodzi z pierścienia do centrum kropki).

Rysunek 5.5b z kolei przedstawia energie kilku najniższych stanów ekscytynu w zależności od wysokości bariery odpychającej  $V_h$ , przy ustalonej wartości promienia kropki kwantowej  $a = 16$  nm. Zakres  $V_h$  został tak dobrany, aby widoczne było przejście nośnika z pierścienia do centrum — gwałtowny skok energii na rysunku. Tak jak w przypadku kropki gaussowskiej, stany o  $l_h > 0$  są zdegenerowane (degeneracja ta zostanie zniesiona w polu magnetycznym), a stany o  $n_e > 1$  oraz  $l_e > 0$  są stanami o dużo wyższych energiach niż te przedstawione na rysunku, dlatego nie zostały na nim uwzględnione. Skok energii ekscytynu, związany z przejściem dziury z centrum do pierścienia wokół centrum kropki, bardzo wyraźny dla stanu podstawowego, jest również widoczny w przypadku innych stanów — zarówno tych z  $n_h > 1$  i  $l_h = 0$  jak i tych z  $n_h = 1$  i  $l_h > 0$ . Dla tych ostatnich jednak następuje on przy znacząco mniejszej wartości wysokości bariery  $V_h$ , ze względu na człon w potencjale związany z momentem pędu, odgrywający rolę bariery odśrodkowej. Dla dużych wartości  $V_h$  energia stanu podstawowego ekscytynu zmienia się nie-



Rysunek 5.6: Zależność kilku najniższych poziomów energetycznych ekscytonu od promienia  $a$  kropki kwantowej, przy ustalonej wysokości bariery dla dziury  $V_h = 110$  meV (a) oraz  $V_h = 10$  meV (b). Dla wszystkich poziomów z tego rysunku  $n_e = 1$  oraz  $l_e = 0$ . Stany z innymi wartościami tych dwóch liczb kwantowych są stanami o wyższych energiach (które nie zostały przedstawione na rysunku).

znacznie, żeby dla opisaney przez nas struktury, dla której  $V_h = 110$  meV, osiągnąć  $-124,8$  meV (przy założeniu, że  $a = 16$  nm).

Zależność energii kilku najniższych stanów ekscytonu od promienia  $a$  prostokątnej kropki kwantowej przedstawiona została na rysunku 5.6a. Wysokość bariery została w tym przypadku ustalona i wynosi  $V_h = 110$  meV, natomiast promień zmienia się w granicach od 10 do 40 nm. W zakresie tym energia stanu podstawowego (jak również energie wyższych stanów) zmienia się gładko — ze względu na dużą wysokość bariery dziura nie może przedostać się do centrum. Ponadto charakterystyczne dla tego spektrum jest ułożenie poziomów energetycznych — kilka najniższych, to poziomy z  $n_h = 1$  i rosnącym  $l_h$ . Inaczej sytuacja ma się w przypadku, gdy wysokość bariery jest niższa. Rysunek 5.6b przedstawia tą samą zależność, ale przy mniejszej wysokości bariery, mianowicie  $V_h = 10$  meV. Dla odpowiednio małego promienia dziura przedostaje się do środka kropki i energia stanu podstawowego ulega znacznemu obniżeniu. Obniżeniu, choć w mniejszym stopniu, ulegają też energie stanów o wyższej liczbie  $n_h$  (czyli stanów o większej liczbie węzłów funkcji falowej dziury). Powoduje to, że kolejność stanów zmienia się znacząco — dla kropek o promieniach około 20 nm dwa najniższe stany, to stany z  $l_h = 0$ . Charakterystyczny jest też brak skoków energii dla stanów o  $l_h \neq 0$  — bariera odśrodkowa uniemożliwia dziurze wejście do centrum kropki pomimo niewielkiej wartości  $V_h$ .

## 5.4 Przejścia międzypasmowe i wewnątrzpa- smowe — dyskusja

Ze wzorów (2.4) oraz (2.7) rozdziału 2 wynika, że prawdopodobieństwo rekombinacji ekscytonu, czyli przejścia międzypasmowego, jest proporcjonalne do kwadratu całki przekrywania funkcji obwiedni nośników. W przeciwieństwie do struktur pierwszego rodzaju w kropkach kwantowych drugiego rodzaju, w dużym zakresie wartości ich parametrów kontrolujących rozmiar, omawiana całka przekrywania jest względnie mała — przekrywanie się funkcji falowej dziury, znajdującej się w pierścieniu dookoła kropki, z funkcją elektronu, skupioną w centrum układu, jest niewielkie. Dlatego czas życia ekscytonów w kropkach kwantowych drugiego rodzaju, w stosunku do czasu życia w ich odpowiednikach pierwszego rodzaju powinien ulec wydłużeniu.

Ponadto ze względu na symetrię cylindryczną układu zachowany jest całkowity moment pędu  $L = l_e + l_h$  i tylko ekscytony z  $L = 0$  mogą rekombinować promieniście, podczas gdy pozostałe stany w przybliżeniu dipolowym pozostają nieaktywne optycznie [83]. Dla cylindrycznie symetrycznych kropek kwantowych, dla których funkcja falowa ekscytonu może być w przybliżeniu Hartree przedstawiona jako iloczyn funkcji jednocząstkowych postaci (4.2), można to pokazać w następujący sposób. Całka przekrywania funkcji falowych elektronu i dziury, do której kwadratu proporcjonalne jest prawdopodobieństwo rekombinacji na jednostkę czasu, może być zapisana w postaci

$$I = \int \psi_e(\mathbf{r})\psi_h(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(l_e+l_h)\varphi} d\varphi \int_0^\infty \phi_e(\rho)\phi_h(\rho)\rho d\rho, \quad (5.1)$$

gdzie całka po kącie, równa jest

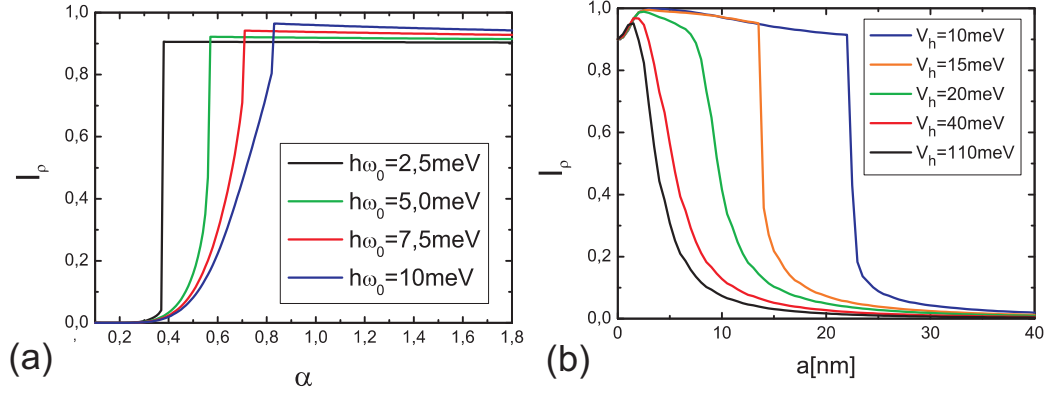
$$I_\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(l_e+l_h)\varphi} d\varphi = \delta_{l_e+l_h}. \quad (5.2)$$

Z powyższych wzorów wynika, że tylko stany z  $L = l_e + l_h = 0$  mogą rekombinować promieniście. Stąd, kiedy procesy relaksacji fononowej zostają odpowiednio osłabione (np. poprzez odpowiednie zmniejszenie temperatury i rozmiaru kropki [84]) tylko stany z  $L = 0$  z zakresu podczerwieni, wniosą znaczący wkład do widma fotoluminescencji.

Dla stanu podstawowego ekscytonu, dla którego  $L = 0$ , całka po kącie jest równa jedności i o prawdopodobieństwie rekombinacji decyduje całka po  $\rho$ , czyli

$$I_\rho = \int_0^\infty \phi_e(\rho)\phi_h(\rho)\rho d\rho. \quad (5.3)$$

Rysunek 5.7 przedstawia zależność  $I_\rho$  dla stanu podstawowego ekscytonu



Rysunek 5.7: Zależność  $I_\rho$  dla stanu podstawowego ekscytonu od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar gaussowskiej kropki drugiego rodzaju dla czterech wartości krzywizny  $\hbar\omega_0$  (a). Zależność  $I_\rho$  dla stanu podstawowego ekscytonu od promienia  $a$  prostokątnej kropki kwantowej dla kilku różnych wartości wysokości bariery  $V_h$  (przy ustalonym  $V_e = -130$  meV) (b). Stała dielektryczna dla kropki gaussowskiej wynosi  $\epsilon = 12,4$ , natomiast dla kropki prostokątnej  $\epsilon = 12,665$ .

od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar gaussowskiej kropki drugiego rodzaju dla czterech wartości krzywizny  $\hbar\omega_0$  (a). Dla  $\hbar\omega_0 = 2,5$  meV całka przekrywania gwałtownie rośnie dla  $\alpha \sim 0,37$ . Dla większych  $\alpha$  (mniejszych kropek) bariera dziury maleje na tyle, że dziura przedostaje się do centrum, a co za tym idzie wzrasta bardzo gwałtownie prawdopodobieństwo rekombinacji ekscytonu. Dla większych krzywizn wartość krytyczna  $\alpha$ , przy której następuje przejście dziury do centrum, jest coraz większa ze względu na fakt, że dla ustalonego  $\alpha$  wysokość bariery dla dziury jest tym większa, im większa jest krzywizna:  $V_0 = \hbar\omega_0/\alpha$ . Ponadto kropka wraz ze wzrostem krzywizny robi się bardziej stroma, co tłumaczy większą wartość całki przekrycia tuż po przejściu dziury do centrum (funkcja falowa elektronu jest bardziej skoncentrowana przez co wartość całki przekrycia wzrasta).

Rysunek 5.7b przedstawia zależność  $I_\rho$  dla stanu podstawowego ekscytonu od promienia  $a$  prostokątnej kropki kwantowej dla kilku wartości wysokości bariery dla dziury  $V_h$ , (przy ustalonym  $V_e = -130$  meV). Dla kropek, dla których  $V_h$  jest niewielkie istnieje krytyczna wartość promienia (dla  $V_h = 10$  meV jest to około 23 nm), poniżej której dziura przechodzi do centrum kropki i znacznie wzrasta całka przekrywania funkcji falowych. Dla dużych wartości  $V_h$ , takich jak w naszym modelu kropki InP/GaAs, gdzie  $V_h = 110$  meV, bariera ta jest zbyt wysoka i dziura pozostaje poza kropką nawet dla bardzo małych  $a$ . Wzrost całki przekrycia w takim przypadku jest spowodowany

zbliżaniem się maksimum funkcji falowej dziury (znajdującego się poza barierą) do centrum kropki, gdzie znajduje się elektron.

Jak to zostanie pokazane w następnym rozdziale, czynnik  $\delta_{l_e+l_h}$  ze wzoru (5.2) będzie odgrywał istotną rolę w przypadku ekscytonu w kropce drugiego rodzaju w polu magnetycznym. Po przekroczeniu pewnej wartości pola magnetycznego dla dziury, znajdującej się w pierścieniu dookoła kropki, staje się korzystne energetycznie zmienić swój moment pędu na wyższy, co pociąga za sobą drastyczny spadek prawdopodobieństwa rekombinacji ekscytonu.

Mając na uwadze, że w cylindrycznie symetrycznych kropkach tylko stany z  $L = l_e + l_h = 0$  z zakresu podczerwieni wnoszą wkład do fotoluminescencji (przejścia międzypasmowe), zajmiemy się teraz przejściami wewnątrzpasmowymi.

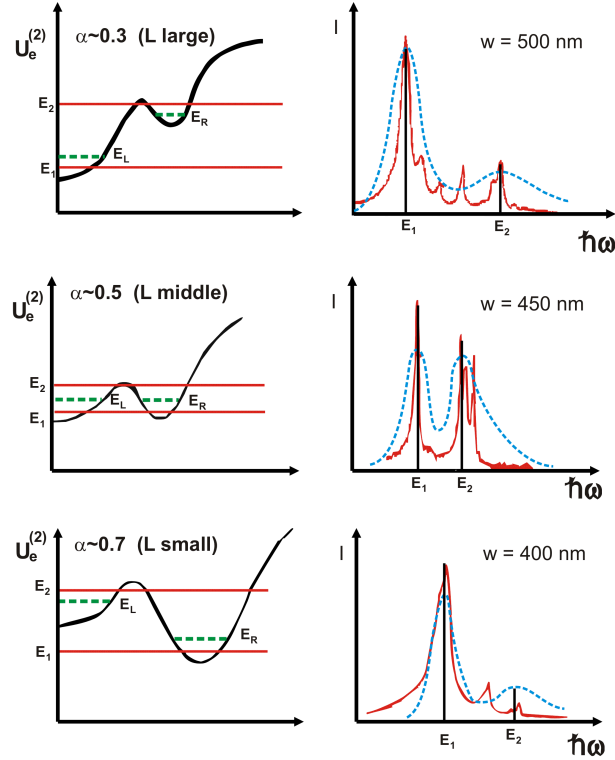
Opisane w podrozdziale 2.3 reguły wyboru dla przejść wewnątrzpasmowych mówią, że aby przejścia promieniste były dozwolone, element dipolowy (2.8) między funkcjami obwiedni musi być niezerowy. W przypadku ekscytonu w kropce oznacza to, że całka przejścia

$$\mathbf{J}_{ij} = \int \Psi_i(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e)\Psi_j(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h \quad (5.4)$$

między dwoma stanami  $\Psi_i$  oraz  $\Psi_j$  ( $\Psi$  to funkcja ekscytonu), nie może znikać.

Na tej podstawie grupa Jacaka, w pracy [53], wysunęła hipotezę, że obserwowana m.in. przez autorów pracy [35] w widmie fotoluminescencji (rysunek 5.8) charakterystyczna para pików jest konsekwencją metastabilności stanów (i świadczy o strukturze drugiego rodzaju obserwowanych kropek). W pracy tej wyliczone zostały analitycznie, w zerowym i pierwszym rzędzie rachunku Hartree, funkcje falowe, potencjały Hartree a także energie elektronu i dziury, w gaussowskiej kropce kwantowej drugiego rodzaju. Na użytek dyskusji stanów metastabilnych zwięźle przedstawimy jak przebiegała procedura obliczeniowa.

Najpierw, przy użyciu metod wariacyjnych, wyliczona została funkcja falowa elektronu w pustej kropce i potencjał Hartree dziury. Następnie przyjęto funkcję falową dziury jako superpozycję funkcji falowych oscylatora znajdujących się w dwóch minimach tego potencjału  $\psi_h = c_1\psi_{h1} + c_2\psi_{h2}$ , przy czym pierwsze minimum znajdowało się w centrum kropki, a drugie tworzyło pierścień dookoła niej. W kolejnym kroku, korzystając z rachunku wariacyjnego (minimalizacja energii), znaleziono dwie pary współczynników superpozycji  $c_1$  i  $c_2$  dla dwóch stanów dziury (obu z  $l_h = 0$ ). Jak się okazało stan podstawowy (dla szerokiego zakresu rozmiarów kropki) charakteryzował się tym, że dziura przebywała w pierścieniu wokół centrum kropki ( $c_2 \gg c_1$ ). Przy założeniu, że dziura znajduje się w tym właśnie stanie wyliczony został poten-



Rysunek 5.8: Charakterystyczna ewolucja widma fotoluminescencji według pracy [53]. Po prawej: widmo fotoluminescencji (za [35]) pojedynczej kropki GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  utworzonej przez dyfuzję wewnątrzwarstwową wywołaną wiązką lasera. Na rysunku zaznaczono względną intensywność obu pików (za [53]). Po lewej: odpowiadający mu dwudolinowy potencjał elektronu dla kilku charakterystycznych rozmiarów kropek.

cjał Hartree elektronu, który, tak jak potencjał dziury, miał charakterystyczną dwudolinową strukturę. Postępując analogicznie jak w przypadku dziury, w potencjale tym, autorzy wyznaczyli dwa najniższe stany (ich energie i funkcje falowe przyjęte w postaci superpozycji  $\psi_e = d_1\psi_{e1} + d_2\psi_{e2}$ , gdzie  $\psi_{e1}$  jest funkcją oscylatora w minimum centralnym, a  $\psi_{e2}$  — przesuniętą funkcją oscylatora w minimum oddalonym). Jeden z tych stanów opisywał elektron w centrum  $d_1 \gg d_2$ , podczas gdy drugi opisywał elektron w pierścieniu  $d_2 \gg d_1$ . Ponieważ oba te stany charakteryzowały się zerowym momentem pędu  $l_e = 0$  autorzy zaproponowali interpretację widma fotoluminescencji 5.8 w oparciu o ich metastabilność — dla stanów ekscytonu w których funkcja falowa jest iloczynem funkcji dziury (którą opisaliśmy) i funkcji elektronu w pierścieniu (pierwszy stan) lub w centrum (drugi stan) znika całka przejścia (5.4), a więc

nie są możliwe przejścia promieniste między nimi. W konsekwencji oba stany powinny dawać wkład do widma fotoluminescencji. Dodatkowo, ponieważ zmiana widma wraz z rozmiarem kropki, wyliczona przez grupę Jacaka, jakościowo pasowała do ewolucji widm zmierzonych przez grupę Brunnera dla różnych rozmiarów kropek, interpretacja tych widm oparta o metastabilność opisanych dwóch stanów ekscytonu znalazła kolejne potwierdzenie (dodatkowym potwierdzeniem było istnienie dwóch pików w widmie fotoluminescencji przy bardzo niskich mocach aktywacji [53]).

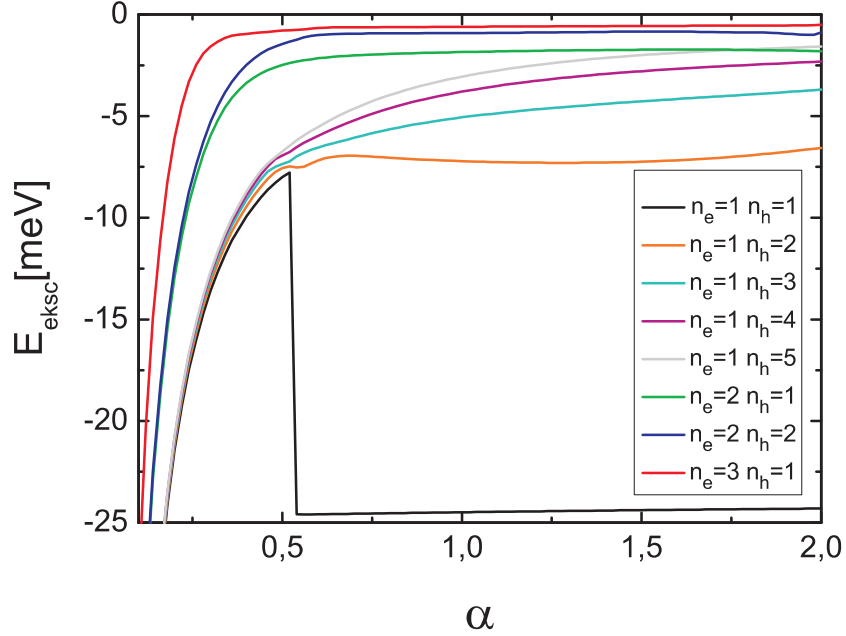
Wykonane przez nas dokładne obliczenia pokazują, że potencjał Hartree elektronu albo w ogóle nie posiada struktury dwudolinowej (mamy wtedy do czynienia tylko z minimum centralnym), albo też drugie minimum jest bardzo niewielkie<sup>1</sup> i dla rozmiarów kropek omawianych w pracy [53] kilka innych, energetycznie niższych, stanów z  $l_e = 0$  znajduje się w minimum centralnym. Ponadto w naszych obliczeniach najniższymi stanami, których momenty pędu  $l_e$  i  $l_h$  są równe zeru, są dla kropki gaussowskiej te, które są zaznaczone na rysunku 5.1 linią ciągłą. Są to stany z  $n_h = 1$ ,  $n_h = 2$ ,  $n_h = 3$  oraz  $n_h = 4$ , a więc charakteryzujące się coraz większą liczbą węzłów funkcji falowej dziury. Dla małych  $\alpha$  (duże kropki) wzajemne odległości energetyczne tych stanów rosną wraz z  $\alpha$ . Po przekroczeniu krytycznej wartości  $\alpha \sim 0,5$ , (czyli dla odpowiednio małej kropki) najniższy stan energetyczny pikuje. Taki gwałtowny skok energii (widoczny również na rysunkach 5.5 i 5.6(b) dla kropki prostokątnej) jest charakterystyczny dla struktur drugiego rodzaju i wiąże się z przechodzeniem jednego z nośników ładunku z bariery do centrum układu.

Energie stanów o wyższych wartościach liczby  $n_e$ , dla których  $l_e = l_h = 0$  razem ze stanami o kilku najniższych wartościach liczby  $n_h$ , dla których również  $l_e = l_h = 0$ , zostały zaprezentowane dla kropki gaussowskiej w zależności od parametru  $\alpha$  na rysunku 5.9. Jak można zauważyć dla dużych kropek (małe  $\alpha$ ) stany dla takich samych  $n_e$  grupują się — potencjał kropki jest bardzo głęboki dla elektronu i o energii ekscytonu decyduje w przeważającym stopniu właśnie energia tej cząstki. Z drugiej strony, dla małych kropek (duże  $\alpha$ ) energia Hartree elektronu nie jest już tak duża i porównywalny z nią wkład pochodzi od energii kulombowskiej (oba nośniki są dla małych kropek uwięzione w centrum kropki) i od energii Hartree dziury (dla wyższych  $n_h$ ).

Dla opisanych powyżej stanów z  $l_e = l_h = 0$ , znika element przejścia (5.4), tak więc wszystkie one mogą być stanami metastabilnymi, które pod nieobecność fononów można zaobserwować w widmie fotoluminescencji cylindrycznie

<sup>1</sup> Dwudolinowa struktura potencjału Hartree, otrzymana przez autorów pracy [53], jest wynikiem błędnego uproszczenia całki Hartree elektronu — w pracy tej przyjęto, że funkcja dana wzorem (B7) przyjmuje wartość maksymalną dla  $x'' = 0$ , podczas gdy w rzeczywistości ma ona maksimum w pobliżu  $x'' = x_{3h} - x_e \cos \theta$ .





Rysunek 5.9: Energie ekscytonu dla  $l_e = l_h = 0$  i różnych liczb  $n_e$  oraz  $n_h$  w zależności od parametru  $\alpha$  kontrolującego rozmiar gaussowskiej kropki kwantowej drugiego rodzaju, Krzywizna kropki to  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, a względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12,4$ .

symetrycznych kropek kwantowych.

## 5.5 Podsumowanie

W rozdziale tym przeanalizowaliśmy widmo fotoluminescencji w zależności od rozmiaru kropki kwantowej drugiego rodzaju dla dwóch różnych kształtów potencjału — gaussowskiego i prostokątnego. Znaleźliśmy rozmiar krytyczny kropki, poniżej którego nośnik znajdujący się w pierścieniu dookoła kropki drugiego rodzaju znajduje się w centrum tej struktury. Jak pokazaliśmy przejście nośnika z pierścienia wokół kropki do jej centrum powinno wiązać się z gwałtowną zmianą natężenia w widmie fotoluminescencji.

Przeanalizowaliśmy również możliwość istnienia stanów metastabilnych w kropkach o symetrii cylindrycznej i przedyskutowaliśmy ich możliwy wpływ na widmo kropki kwantowej drugiego rodzaju.



## Rozdział 6

# Ekscyton w kropce kwantowej drugiego rodzaju w polu magnetycznym

Niniejszy rozdział poświęcimy na opis ekscytonu utworzonego na kropce kwantowej drugiego rodzaju umieszczonej w prostopadłym do jej płaszczyzny magnetycznym.

Najpierw, w podrozdziale 6.1, podamy opis pojedynczej cząstki w polu magnetycznym, a następnie, korzystając z przybliżenia Hartree, uogólnimy ten opis na przypadek ekscytonu związanego przez kropkę kwantową (podrozdział 6.2).

Jak się okazuje, w przypadku kropki drugiego rodzaju po przekroczeniu pewnej wartości pola magnetycznego dla ekscytonu w stanie podstawowym staje się korzystne energetycznie zmienić swój moment pędu na wyższy. Związane z tym oscylacje Aharonova-Bohma w widmie fotoluminescencji są charakterystyczne wyłącznie dla struktur drugiego rodzaju, w których przynajmniej jeden z nośników ładunku znajduje się w pierścieniu dookoła kropki kwantowej. Opisowi tego efektu poświęcone będą podrozdziały 6.3–6.5, przedstawiające wyniki doświadczalne i wyniki teoretyczne uzyskane w ramach przybliżenia Hartree, a także podrozdział 6.6 w którym porównamy te rezultaty.

### 6.1 Naładowana cząstka w polu magnetycznym

Rozpatrzmy teraz naładowaną cząstkę w prostopadłym do płaszczyzny dwuwymiarowej studni polu magnetycznym. Nasz model ograniczymy tyl-

ko do współrzędnych przestrzennych — spinowe stopnie swobody i związane z nimi rozszczepienie Zeemana (liniowe w stosunku do pola) nie zostały uwzględnione w naszym opisie (dla GaAs rozszczepienie to jest bardzo małe  $\sim 0,03 \text{ meV/T}$ , natomiast dla InP wynosi ono około  $0,12 \text{ meV/T}$  [82]).

Przyjmujemy, że pole magnetyczne jest stałe, jednorodne i skierowane wzdłuż osi  $z$

$$\mathbf{B} = B\mathbf{k}.$$

Dla takiego pola wybieramy potencjał wektorowy w postaci

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y\mathbf{i} + x\mathbf{j}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (6.1)$$

Przy takim wyborze

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (6.2)$$

mamy więc do czynienia z cechowaniem kulombowskim.

Hamiltonian cząstki o masie  $m$  i ładunku  $q$  znajdującej się w polu magnetycznym ma postać<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A})^2}{2m} + V \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{2m}(\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{q^2\mathbf{A}^2}{2m} + V. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Po uwzględnieniu relacji  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow -i\hbar\nabla$  oraz wzoru (6.2), pierwszy człon w nawiasie w działaniu na stan  $\psi$  daje

$$\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}\psi = -i\hbar\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = -i\hbar[(\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + \mathbf{A} \cdot \nabla\psi] = -i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla\psi = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi$$

i równanie (6.3) przejdzie w

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{q^2\mathbf{A}^2}{2m} + V. \quad (6.4)$$

<sup>1</sup> Klasyczny wzór na pęd uogólniony cząstki znajdującej się w polu magnetycznym ma postać

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}} = p_x + qA_x = \Pi_x.$$

Pędem sprzężonym ze współrzędną  $x$  jest więc pęd  $\Pi_x$ . Standardowa procedura kwantowania prowadzi do wzoru  $\hat{\Pi}_x = -i\hbar\partial/\partial x$ , a stąd

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - qA_x.$$

We współrzędnych biegunowych, w płaszczyźnie x-y, potencjał wektorowy (6.1) można zapisać w postaci

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\mathbf{e}_\varphi \quad (6.5)$$

wtedy drugi wyraz (6.4) przejdzie w

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} = A_\varphi \hat{p}_\varphi = \frac{1}{2}B\rho \left( \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -\frac{i\hbar B}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

i wstawiając do trzeciego wyrazu (6.4) potencjał wektorowy dany przez (6.5), możemy hamiltonian przepisać w postaci

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar qB}{2m} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{q^2 B^2}{8m}\rho^2,$$

lub rozpisując laplasjan we współrzędnych biegunowych

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{i\hbar qB}{2m} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{q^2 B^2}{8m}\rho^2.$$

Jeżeli cząstka dodatkowo znajduje się w potencjale np. kropki kwantowej, wtedy do powyższego hamiltonianu należy dodać człon  $V$  opisujący ten potencjał. Jeżeli posiada on symetrię cylindryczną, tzn.  $V = V(\rho)$ , funkcję falową cząstki możemy przedstawić w postaci iloczynu (4.2) i z równania na wartości własne,  $\hat{H}\psi = E\psi$ , otrzymujemy równanie na funkcję radialną

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{l^2}{\rho^2} \right] + \frac{l}{2}\hbar\omega_c + \frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2 + V(\rho) \right\} \phi(\rho) = E\phi(\rho), \quad (6.6)$$

gdzie

$$\omega_c = \frac{qB}{m}$$

to częstość cyklotronowa cząstki.

Wprowadzając oznaczenie

$$E' = E + \frac{l}{2}\hbar\omega_c$$

możemy równanie (6.6) przepisać w bardziej zwartej postaci

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{l^2}{\rho^2} \right] + \frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2 + V(\rho) \right\} \phi(\rho) = E'\phi(\rho). \quad (6.7)$$

## 6.2 Opis metodą Hartree ekscytonu w polu magnetycznym

Wykorzystając przybliżenie Hartree możemy zastosować powyżej wprowadzony opis cząstki w polu magnetycznym do elektronu i dziury tworzących ekscyton w kropce kwantowej, w obecności pola magnetycznego. W tym celu zastępujemy potencjały  $V_e$  i  $V_h$  potencjałami Hartree danymi przez (3.7) oraz (3.8), i równania jednocząstkowe, które musimy rozwiązać, będą teraz miały postać

$$\hat{\mathcal{H}}_e \psi_e(\mathbf{r}_e) = \varepsilon'_e \psi_e(\mathbf{r}_e), \quad (6.8)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_h \psi_h(\mathbf{r}_h) = \varepsilon'_h \psi_h(\mathbf{r}_h), \quad (6.9)$$

gdzie

$$\hat{\mathcal{H}}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} \left( \rho_e \frac{\partial}{\partial \rho_e} \right) - \frac{l_e^2}{\rho_e^2} \right] + \frac{1}{8} m_e \omega_{ce}^2 \rho_e^2 + \mathcal{U}_e(\rho_e), \quad (6.10)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h} \left[ \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} \left( \rho_h \frac{\partial}{\partial \rho_h} \right) - \frac{l_h^2}{\rho_h^2} \right] + \frac{1}{8} m_h \omega_{ch}^2 \rho_h^2 + \mathcal{U}_h(\rho_h), \quad (6.11)$$

$$\varepsilon'_e = \varepsilon_e - \frac{l_e}{2} \hbar \omega_{ce},$$

$$\varepsilon'_h = \varepsilon_h + \frac{l_h}{2} \hbar \omega_{ch},$$

a  $\omega_{ce}$  i  $\omega_{ch}$  to częstości cyklotronowe odpowiednio elektronu i dziury, dane wzorami

$$\omega_{ce} = \frac{qB}{m_e},$$

$$\omega_{ch} = \frac{qB}{m_h}.$$

Pod wpływem pola magnetycznego zarówno elektrony jak i dziury ulegają ściśnięciu — w hamiltonianach (6.10) i (6.11) odpowiedzialne są za to, człony landauowskie  $\frac{1}{8} m_i \omega_{ci}^2 \rho_i^2$ . Ponadto, w polu lub pod jego nieobecność, gdy cząstka (elektron lub dziura) ma orbitalny moment pędu różny od zera, pojawia się bariera odśrodkowa. Ze względu na poglądowość i użyteczność, zamiast potencjałami Hartree danymi wzorami (3.7) i (3.8), będziemy często

posługiwać się „efektywnymi potencjałami Hartree” (odpowiednikami potencjału (4.4) bez pola magnetycznego) zdefiniowanymi w następujący sposób

$$\begin{aligned} U_e(\rho_e) &= \mathcal{U}_e(\rho_e) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l_e^2}{\rho_e^2} + \frac{1}{8} m_e \omega_{ce}^2 \rho_e^2, \\ U_h(\rho_h) &= \mathcal{U}_h(\rho_h) + \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{l_h^2}{\rho_h^2} + \frac{1}{8} m_h \omega_{ch}^2 \rho_h^2. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Korzystając z tych potencjałów możemy zapisać równania Hartree (6.8) i (6.9) w postaci

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} \left( \rho_e \frac{\partial}{\partial \rho_e} \right) + U_e(\rho_e) \} \phi_e(\rho_e) = \varepsilon'_e \phi_e(\rho_e), \\ -\frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} \left( \rho_h \frac{\partial}{\partial \rho_h} \right) + U_h(\rho_h) \} \phi_h(\rho_h) = \varepsilon'_h \phi_h(\rho_h) \end{cases}$$

i do ich rozwiązywania użyć metod numerycznych wprowadzonych w rozdziale 4.

Wyniki rozwiązywania powyższego samouzgodnionego układu równań Hartree przedstawimy w podrozdziale 6.5. Zanim jednak do tego przystąpimy, podamy krótki opis teoretyczny oscylacji Aharonova-Bohma, czyli zjawiska charakterystycznego dla struktur drugiego rodzaju w polu magnetycznym, a także przedstawimy wyniki doświadczalne ilustrujące to zjawisko.

## 6.3 Oscylacje Aharonova-Bohma

Aharonov i Bohm zaproponowali eksperyment, który ujawnił wpływ potencjału elektromagnetycznego na naładowaną cząstkę poruszającą się dookoła zamkniętego strumienia magnetycznego [85]. Po okrążeniu takiego zamkniętego strumienia cząstka zyskuje fazę, która jest proporcjonalna do strumienia pola magnetycznego zamkniętego w obrębie trajektorii. Dlatego wszystkie obserwowalne zjawiska zależne od strumienia poprzez pętlę, którą tworzy zamknięta trajektoria, są periodyczne z okresem równym uniwersalnemu kwantowi strumienia  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q$  [86, 87, 88].

Kropka kwantowa drugiego rodzaju, dzięki jej potencjałowi w kształcie pierścienia (dla jednego typu nośników) pozwala na badanie niejednorodnych geometrii i może posłużyć do demonstracji oscylacji Aharonova-Bohma. Cechą charakterystyczną takiego układu wstawionego w pole magnetyczne jest periodyczna zależność energii od pola [89]. W naszym przypadku para elektron-dziura (ekscyton) związana w kropce kwantowej drugiego rodzaju dzięki kulombowskiemu przyciąganiu nośników ładunku tworzy strukturę,

w której dziura jest uwięziona w pierścieniu wokół kropki, a zatem oscylacje z okresem  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q$  są związane z jej trajekcją i strumieniem pola, który ona otacza.

Dla prostoty rozważań przyjmijmy za potencjał kropki kwantowej drugiego rodzaju prostą studnię cylindryczną

$$V_{e,h}(\rho_e, \rho_h) = \begin{cases} V_{e,h}, & \text{jeżeli } \rho_{e,h} > R, \\ 0, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases}$$

gdzie  $R$  to promień kropki,  $V_e > 0$  i  $V_h < 0$ . Jeśli teraz założymy, że dziura znajduje się dokładnie w pierścieniu o promieniu  $R_h$ , wtedy  $\partial/\partial\rho_h = 0$  i, korzystając z (6.7), zmianę energii dziury z polem magnetycznym możemy zapisać w postaci

$$E_h = \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{l_h^2}{R_h^2} + \frac{l_h}{2} \hbar\omega_h + \frac{1}{8} m_h \omega_h^2 R_h^2 + V_h(R_h),$$

co po uproszczeniach i pominięciu ostatniego, stałego czynnika, daje

$$E_h = \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{1}{R_h^2} \left( l_h - \frac{\Phi_h}{\Phi_0} \right)^2, \quad (6.13)$$

gdzie  $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q$  to kwant strumienia pola magnetycznego, a  $\Phi_h = \pi R_h^2 B$  to strumień przechodzący przez pierścień o promieniu  $R_h$ , w którym znajduje się dziura. Otrzymany wzór stanowi uproszczone wyrażenie na zmianę energii dziury w polu magnetycznym. Z postaci tego wzoru wynika, że przeskok momentu pędu będą się zdarzały za każdym razem, kiedy strumień pola przez pierścień wzrośnie o jeden kwant.

## 6.4 Wyniki doświadczalne

Efekt Aharonova-Bohma w samorosnących kropkach kwantowych drugiego rodzaju InP/GaAs był tematem prac [89, 90] w kropkach ZnTe/ZnSe — prac [91, 92, 93], a w kropkach Ge/Si — pracy [94]. Poniżej przedstawimy wyniki doświadczalne z pracy [89] uzyskane przez grupę Ribeiro, które potwierdzają istnienie oscylacji Aharonova-Bohma w widmach kropek drugiego rodzaju w polu magnetycznym.

Jeżeli boczny potencjał samorosnącej kropki kwantowej przybliżymy za pomocą paraboli [45, 46, 47] zależność energii  $E_{PL}$  (czyli położenia pików związanego z rekombinacją ekscytonu) od pola magnetycznego będziemy mogli przedstawić jako sumę trzech wyrazów [89], z których pierwszy,  $E_g$ , to energia przerwy wzbronionej, drugi opisuje diamagnetyczne przesunięcie energii



stanu podstawowego elektronu [95], a trzeci to dana wzorem (6.13) zmiana energii dziury z polem magnetycznym:

$$E_{PL}(R_h, B) = E_g + \sqrt{(\hbar\omega_0)^2 + \left(\frac{\hbar\omega_e}{2}\right)^2} + \frac{\hbar^2}{2m_h R_h^2} \left(l_h - \frac{\Phi_h}{\Phi_0}\right)^2.$$

We wzorze tym  $m_h$  to masa efektywna dziury,  $\omega_e = qB/m_e$  to częstość cyklotronowa elektronu i  $\Phi_h = \pi R_h^2 B$  to strumień pola magnetycznego przez pierścień o promieniu  $R_h$ . Następnie oznaczając energię przesunięcia diamagnetycznego elektronu przez  $E_e$  możemy przepisać zależność energii dziury od pola magnetycznego jako różnicę

$$E_h(R_h, B) = E_{PL} - E_g - E_e = \frac{\hbar^2}{2m_h R_h^2} \left(l_h - \frac{\Phi_h}{\Phi_0}\right)^2. \quad (6.14)$$

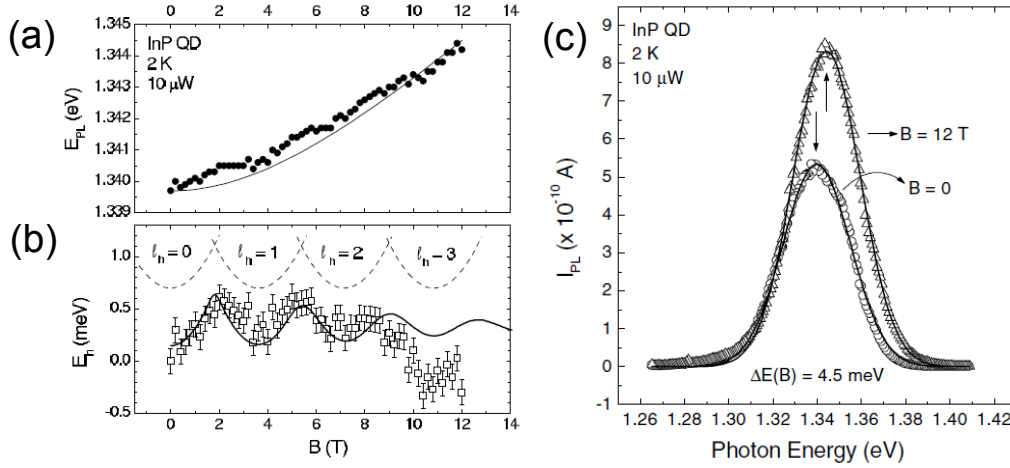
Rysunek 6.1 przedstawia pozycję pików w widmie fotoluminescencji jako funkcję pola magnetycznego (a) oraz zależność energii dziury od pola magnetycznego (b) dla samorosnących kropek kwantowych drugiego rodzaju InP/GaAs badanych doświadczalnie za pomocą spektroskopii pojemnościowej przez grupę E. Ribeiro [89]. Zależność energii dziury od pola magnetycznego została wyznaczona na podstawie wzoru (6.14) czyli przez odjęcie od energii  $E_{PL}$  wkładu pochodzącego od diamagnetyzmu elektronu i stałego czynnika  $E_g$ . Średnice kropek zmierzone elektronowym mikroskopem transmisyjnym<sup>2</sup> wynosiły  $(32 \pm 6)$  nm, a wysokości kropek  $h = (4 \pm 2)$  nm. Charakterystyczna energia dla samorosnących kropek InP/GaAs, wzrastających pod identycznymi warunkami, została wyznaczona w pracy [89] i wynosi  $\hbar\omega_0 = (5,6 \pm 0,9)$  meV. Jak widać z rysunku 6.1(b) energia dziury  $E_h$  wyraźnie oscyluje jako funkcja pola magnetycznego. Do danych eksperymentalnych dopasowane zostały parabole przy użyciu równania (6.14) dla każdej wartości momentu pędu spośród  $l_h = 0, 1, 2, 3$  wskazującej ilość kwantów strumienia zamkniętych w pierścieniu. Z dopasowania tego wyznaczone zostały efektywne promień pierścienia  $R_h = (19,1 \pm 0,4)$  nm oraz  $\Phi_0 = 3,61$  T. Promień pierścienia uzyskany w ten sposób jest nieco większy od promienia kropki kwantowej, tzn.  $R_h > R$ , co świadczy o tym, że dziura jest utrzymywana przez przyciąganie kulombowskie elektronu tuż poza kropką.

## 6.5 Rezultaty teoretyczne

### Kropka gaussowska

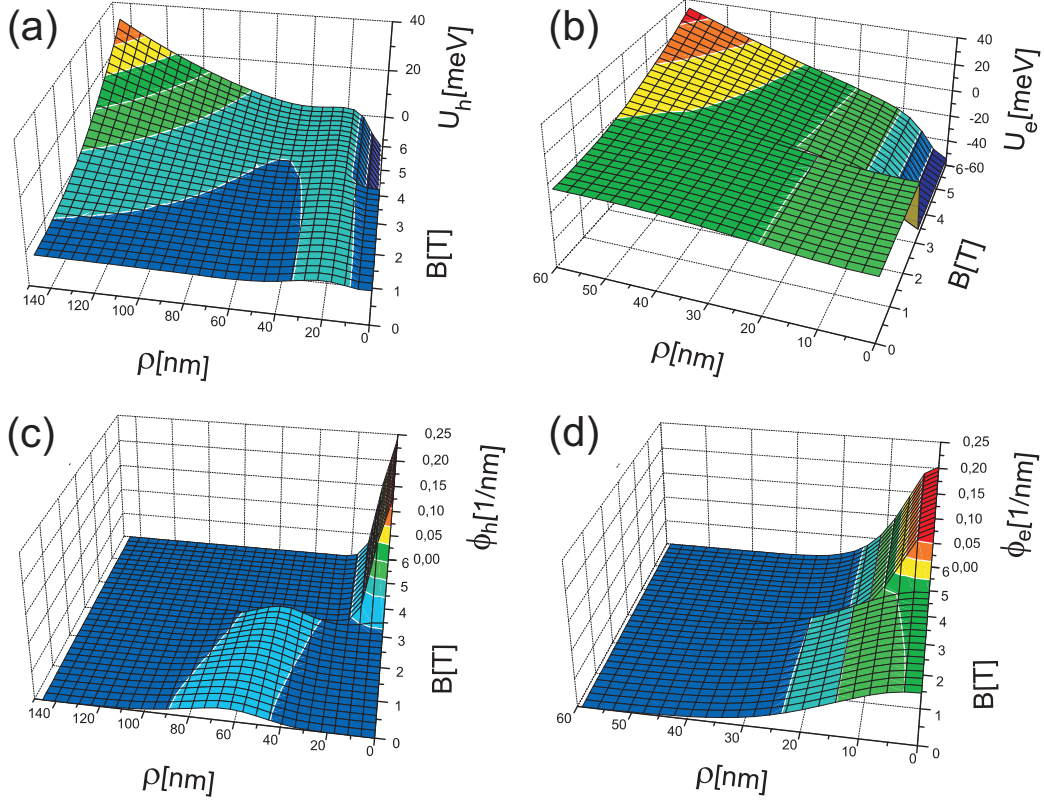
Rysunek 6.2 ilustruje zależność od pola magnetycznego efektywnych po-

<sup>2</sup>Ang. *Transmission Electron Microscopy*, TEM



Rysunek 6.1: Pozycja pików w widmie fotoluminescencji jako funkcja pola magnetycznego (wypełnione kropki) (a). Zależność energii dziury od pola magnetycznego (puste kwadraty) ukazująca oscylacje Aharonova-Bohma z okresem  $\Phi_0$  (b). Linie kreskowane tworzą dopasowanie paraboliczne za równaniem (6.14) (na rysunku przesunięte o arbitralną wartość energii). Widmo fotoluminescencji w polu  $B = 0$  T (kółka) oraz w polu  $B = 12$  T (kwadraty) (c). Średnice kropek wynosiły  $(32 \pm 6)$  nm, a ich wysokości  $h = (4 \pm 2)$  nm (za [89]).

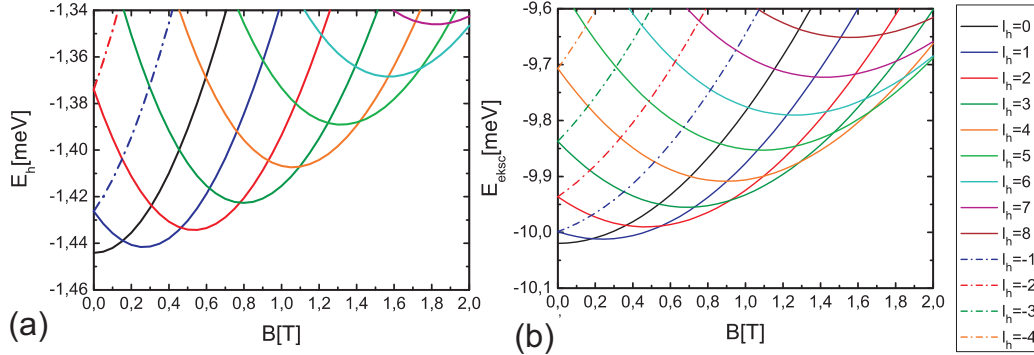
tencjałów Hartree (6.12) i funkcji falowych elektronu i dziury, opisujących stan ekscytonu o przybliżonych liczbach kwantowych  $n_h = n_e = 1$  i  $l_h = l_e = 0$  w kropce utworzonej za pomocą ogniskowania elektrostatycznego w studni z GaAs. W obliczeniach przyjęto stałą krzywiznę kropki wynoszącą  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, i względną stałą dielektryczną materiału studni  $\epsilon = 12$  (masy efektywne elektronu i dziury wynoszą odpowiednio  $m_e/m_0 = 0,067$  i  $m_h/m_0 = 0,45$ ). Parametr  $\alpha = 0,4$  został tak wybrany, żeby otrzymać strukturę ekscytonu typową dla kropki kwantowej drugiego rodzaju — potencjał kropki jest na tyle duży w porównaniu do przyciągania kulombowskiego, że dziura znajduje się w pierścieniu dookoła centrum (elektron natomiast zlokalizowany jest w centrum kropki). Pod wpływem pola magnetycznego dziura jest „ściskana” (za co odpowiedzialny jest człon Landauowskiego w jej hamiltonianie) i dla pewnej wartości tego pola staje się dla niej korzystne energetycznie przejście do centrum kropki — lokalne minimum potencjału Hartree (rysunek 6.2a) tworzące pierścień staje się wraz ze wzrostem pola coraz płytsze, żeby po przekroczeniu krytycznej wartości  $B \sim 3,5$  T zniknąć prawie zupełnie. Dla pól większych od tego pola krytycznego dziura zajmuje już minimum w centrum kropki (rysunek 6.2c).



Rysunek 6.2: Efektywne potencjały Hartree dziury (a) i elektronu (b) i ich funkcje falowe (c) i (d) w zależności od wartości pola magnetycznego  $B$  prostopadłego do płaszczyzny kropki. Krzywizna kropki to  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12$ , a parametr kontrolujący rozmiar kropki  $\alpha = 0,4$ .

Pole magnetyczne „ściska” także elektron, choć jego bezpośredni wpływ (poprzez człon landauowski), ze względu na lokalizację tego nośnika w centrum kropki kwantowej, stanowiącej dla niego studnie przyciągającą, nie jest tak wielki jak w przypadku dziury (rysunek 6.2d). Większy wpływ na elektron pole magnetyczne wywiera pośrednio przez dziurę, która dla wartości krytycznej przechodzi do minimum w centrum, przez co zwiększa się oddziaływanie kulombowskie pomiędzy nośnikami ładunku tworzącymi ekscyton, co wpływa na obniżenie się minimum potencjału Hartree (maleje całka Hartree) i w konsekwencji obniżenie się energii Hartree elektronu.

Powyżej opisany stan jest stanem podstawowym jedynie dla niewielkich wartości pola magnetycznego. Jak się okazuje, w miarę zwiększania pola magnetycznego, korzystniejsze energetycznie dla dziury, (a także dla całego ekscytonu) staje się zwiększenie momentu pędu. Moment pędu stanu podstawowego



Rysunek 6.3: Zależność energii Hartree dziury (a) oraz energii ekscytonu (b) od pola magnetycznego  $B$  prostopadłego do płaszczyzny kropki dla różnych wartości momentu pędu  $l_h$ . Krzywizna kropki to  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12$ , a parametr kontrolujący rozmiar kropki  $\alpha = 0,4$ .

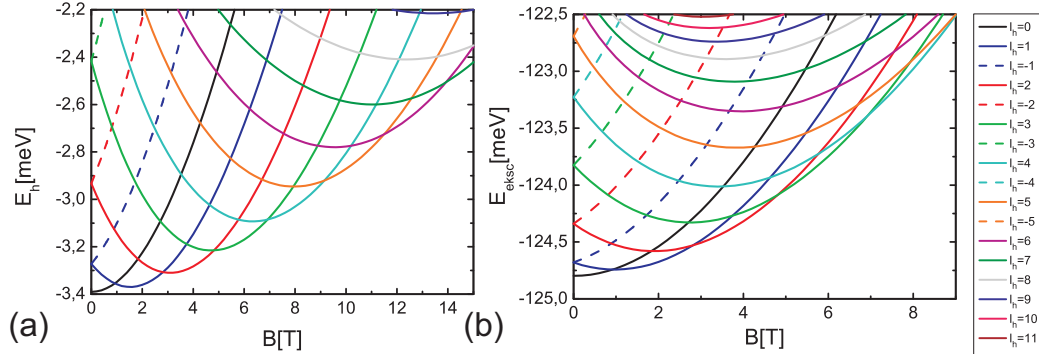
wego rośnie więc skokowo wraz z wartością pola (podrozdziału 6.3).

Rysunek 6.3 ilustruje przeskok momentu pędu stanu podstawowego ekscytonu w omawianej kropce. Zarówno w zależności energii Hartree dziury, jak i energii ekscytonu widać, że moment pędu dziury  $l_h$  w stanie podstawowym zmienia się (rośnie) co około 0,31 T. Daje to efektywną wartość promienia funkcji falowej dziury  $R_h \approx 65$  nm. Wartość tą należy porównać z szerokością kropki, którą w przypadku kropki gaussowskiej, opisanej przez (1.1), możemy oszacować za pomocą parametru  $L$ .  $L$  jest szerokością kropki w  $\sim 0,368$  jej wysokości<sup>3</sup> i dla używanych przez nas parametrów ( $\alpha = 0,4$  oraz  $\hbar\omega_0 = 5$  meV) wynosi około  $L \approx 34$  nm. Funkcja falowa dziury mniej więcej od tej wartości promienia zaczyna przybierać wyraźnie niezerowe wartości (dla pola  $B = 0$ ), żeby w odległości 70 nm, nieco większej niż efektywny promień  $R_h$ , przybrać wartość maksymalną (porównaj rysunek 6.2c).

Dla pól magnetycznych większych od około 3 T dziura w stanie z  $l_h = 0$  jest (jak to wynika z rysunku 6.2c) wpychana przez pole do centrum kropki i jej energia gwałtownie spada. Energia całego ekscytonu również maleje i stan ten (z  $l_h = l_e = 0$ ), po przekroczeniu tej krytycznej wartości pola, na powrót staje się stanem podstawowym.

Energie stanów o wyższych momentach pędu dziury ( $l_h > 0$ ) również zmniejszają się po przekroczeniu pewnej krytycznej wartości pola magnetycznego (tym większej im większe  $l_h$ ), ale ich spadek nie jest tak gwałtowny

<sup>3</sup> Ponieważ potencjał jest postaci  $\exp(-\rho^2/L^2)$  szerokość  $L$  zostaje osiągnięta dokładnie w  $e^{-1}$  jego wartości, gdzie  $e$  jest podstawą logarytmów naturalnych.



Rysunek 6.4: Zależność energii Hartree dziury (a) oraz energii ekscytonu (b) od pola magnetycznego  $B$  prostopadłego do płaszczyzny prostokątnej kropki kwantowej dla różnych wartości momentu pędu  $l_h$ . Parametry kropki to  $V_e = -130$  meV,  $V_h = 110$  meV,  $a = 16$  nm, a względna stała dielektryczna materiału studni  $\epsilon = 12,665$ .

jak w przypadku stanu z  $l_h = 0$ .

## Kropka prostokątna

Dla kropki prostokątnej InP/GaAs omawianej w podrozdziale 5.3 (o barierach potencjału  $V_e = -130$  meV i  $V_h = 110$  meV i promieniu  $a = 16$  nm oraz względnej stałej dielektrycznej materiału studni  $\epsilon = 12,665$ ) dziura przechodzi do centrum kropki dopiero dla wartości pola magnetycznego wynoszącej około 67 T. Dla wartości od 0 do 67 T znajduje się w pierścieniu dookoła centrum przez co powinny być możliwe obserwacje oscylacji Aharonova-Bohma.

Rysunek 6.4 ilustruje przeskok momentu pędu stanu podstawowego ekscytonu związanego przez taką kropkę. Z zależności energii Hartree dziury od pola magnetycznego widać, że moment pędu  $l_h$  stanu podstawowego zmienia się (rośnie) co około 2 T. Daje to efektywną wartość promienia funkcji falowej dziury  $R_h \approx 25,7$  nm. Zgodnie z oczekiwaniami wartość ta jest większa od promienia kropki wynoszącego  $a = 16$  nm (dziura znajduje się w pierścieniu w niewielkiej odległości od bariery) i prawie równa promieniowi maksimum funkcji falowej dziury równemu około  $a_{maks} = 25$  nm.

## 6.6 Dyskusja i porównanie wyników

Jak widać z rysunków 6.1(b), 6.4 oraz 6.3 kiedy pole magnetyczne wzrasta dziura zmienia swój moment pędu od  $l_h = 0$  do  $l_h = 1, 2, 3, \dots$ , a co za

tym idzie stan podstawowy ekscytonu zmienia swój moment pędu. Opisane przeskoki momentu pędu w kropkach kwantowych drugiego rodzaju mogą być rozumiane w następujący sposób. Wzrost pola magnetycznego wzmacnia lokalizację dziury i pcha ją w kierunku odpychającego potencjału kropki. Prowadzi to do wzrostu energii potencjalnej dziury i, dla pewnej wartości pola magnetycznego, czyni korzystnym energetycznie dla dziury przeskoczenie do stanu z wyższym momentem pędu. Dziura może wtedy rozpląnąć się w szerszym obszarze w pobliżu potencjału kropki [75].

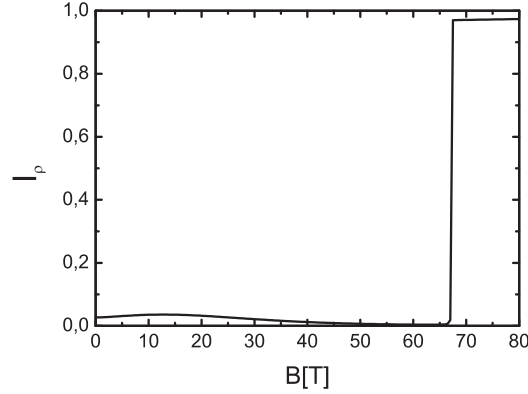
Wartość krytycznego pola magnetycznego, które powoduje przeskoczenie do stanu o wyższym momencie pędu zależy od rozmiaru kropki i maleje wraz ze wzrostem promienia kropki ponieważ strumień pola magnetycznego przez większą kropkę jest większy.

W przeciwieństwie do kropek drugiego rodzaju, w kropkach pierwszego rodzaju, również cylindrycznie symetrycznych, stan podstawowy ekscytonu zawsze charakteryzuje się całkowitym momentem pędu  $L = 0$ . Rosnące pole magnetyczne, ściskając funkcje falowe elektronu i dziury, prowadzi do wzrostu prawdopodobieństwa rekombinacji (rośnie wartość całki (5.3)), co z kolei prowadzi do wzrostu fotoluminescencji ze stanu podstawowego [96, 97].

Jeśli mamy do czynienia z cylindrycznie symetrycznymi kropkami drugiego rodzaju o wysokich barierach potencjału (np. z kropkami GaSb/GaAs [98] lub z omawianymi kropkami InP/GaAs o promieniach większych od około 10 nm — porównaj rysunek 5.7), całka przekrywania funkcji radialnych (5.3) jest bardzo mała (z uwagi na separację przestrzenną nośników w strukturze drugiego rodzaju) i, jak to przedstawia rysunek 6.5 (stan z  $l_h = l_h = 0$  i  $n_e = n_h = 1$ ), niewiele zmienia się z polem magnetycznym w dużym zakresie wartości pól. Decydującą rolę odgrywa więc całka po kącie (5.2), która jest równa zero (w przypadku cylindrycznie symetrycznych kropek) jeśli  $L = l_e + l_h \neq 0$  (wzór (5.2), podrozdział 5.4). Stąd, jeśli całkowity moment pędu nie jest równy zero, stan podstawowy ekscytonu w cylindrycznie symetrycznej kropce nie ma wkładu do fotoluminescencji. Dlatego też przeskoki momentu pędu nośnika znajdującego się w pierścieniu, w cylindrycznie symetrycznej kropce, powinny manifestować się przez wygaszanie pików w widmie fotoluminescencji po przejściu krytycznego pola magnetycznego, w którym ten przeskoczenie następuje. Efekt ten jest charakterystyczny tylko dla kropek kwantowych drugiego rodzaju o symetrii cylindrycznej.

Doświadczalna obserwacja oscylacji Aharonova-Bohmy w widmie fotoluminescencji, jest możliwa w przypadku kropek InP/GaAs dzięki ich kształtowi. Są one mianowicie nieco wydłużone w jednym z kierunków, przez co nie posiadają symetrii cylindrycznej i stan podstawowy, który dla rosnącego pola magnetycznego ma coraz wyższy moment pędu, jest aktywny optycznie.

Jak to zostało opisane w podrozdziale 6.4 z dopasowania krzywych do



Rysunek 6.5: Zależność całki przekrywania  $I_\rho$  od pola magnetycznego dla stanu z  $l_e = l_h = 0$  i  $n_e = n_h = 1$ . Stan ten jest stanem podstawowym dla pól magnetycznych mniejszych od około 1 T i większych od 67 T. Dla pól w przedziale 1 – 67 T stan podstawowy charakteryzuje się wyższym momentem pędu, a co za tym idzie prawdopodobieństwo rekombinacji ekscytonu, utworzonego na cylindrycznie symetrycznej kropce, spada do zera.

wyników doświadczalnych (widma fotoluminescencji), dla kropek InP/GaAs w polu magnetycznym, został wyznaczony efektywny promień pierścienia, w którym znajduje się dziura. Promień ten równy  $R_h = 19,1$  nm okazał się być nieco większy od promienia kropki zmierzonego doświadczalnie, równego około  $R = 16$  nm.

Obliczenia Hartree dla prostokątnych kropek o takim promieniu (podrozdział 6.5) i wysokości barier dla elektronu i dziury wynoszących odpowiednio  $V_e = -130$  meV i  $V_h = 110$  meV, dały oscylacje w widmie fotoluminescencji, z których wyznaczony został efektywny promień dziury wynoszący  $a = 25,7$  nm. Większa wartość tego promienia, uzyskana na drodze teoretycznej, może sugerować przyjęcie w naszym modelu niedokładnych przesunięć energetycznych, heterostruktury powstałej z połączenia InP i GaAs, bądź też fakt, że kropki InP/GaAs mogą charakteryzować się kształtem, znacząco odbiegającym od prostokątnej studni, który pozwoliłby funkcji falowej dziury na wnikięcie bliżej centrum kropki.

Poza wyznaczeniem efektywnego promienia  $R_h$  autorzy pracy [89] wyznaczyli przesunięcie energii ekscytonu w polu magnetycznym. Dla kropek InP/GaAs, jak wynika z rysunku 6.1(c), wzrost pola magnetycznego od 0 T do 12 T powoduje przesunięcie piku fotoluminescencji o 4,5 meV w kierunku wyższych energii (obliczenia Hartree dla kropki prostokątnej dają przesunięcie piku wynoszące około 4 meV) przy jednoczesnym wzroście natężenia piku o około 50% [89].

## 6.7 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale omówiliśmy wpływ na widmo fotoluminescencji kropek kwantowych drugiego rodzaju prostopadłego do ich płaszczyzny pola magnetycznego. Pokazaliśmy, że rachunki Hartree prowadzą do przeskoków momentu pędu stanu podstawowego ekscytonu w gaussowskich i prostokątnych kropkach i związanych z nimi oscylacji Aharonova-Bohma. Nasze wyniki dla kropek prostokątnych porównaliśmy z wynikami doświadczalnymi dla kropek z InP/GaAs. Na drodze teoretycznej otrzymaliśmy nieco większy rozmiar promienia kropek od zmierzonego doświadczalnie, czego przyczyn dopatrujemy się w niedokładnych danych związanych z przesunięciami energetycznymi w strukturze InP/GaAs, bądź też w przyjętym prostokątnym kształcie kropki.

Wyznaczyliśmy również krytyczną wartość pola magnetycznego, przy której nośnik, który pod nieobecność pola znajduje się w pierścieniu dookoła kropki, przechodzi do centrum kropki. Jak pokazaliśmy, z przejściem tym, powinien wiązać się duży wzrost natężenia w widmie fotoluminescencji kropki kwantowej drugiego rodzaju.



## Rozdział 7

# Ekscyton w kropce kwantowej drugiego rodzaju w bocznym polu elektrycznym

Jednym ze zjawisk charakterystycznych dla kropek kwantowych, jest przesunięcie ku czerwieni energii ekscytonu pod wpływem pola elektrycznego — tzw. kwantowy efekt Starka (ang. *quantum confined Stark effect*). Energia ekscytonu zwykle maleje z kwadratem pola elektrycznego, co wpływa na zmniejszenie częstości wysyłanego i pochłanianego przez kropkę światła. Ponadto pole elektryczne przesuwa nośniki ładunku w przeciwne strony, a tym samym indukuje moment dipolowy ekscytonu. Funkcje falowe rozsuniętych w polu cząstek przekrywają się w mniejszym stopniu i spodziewać się można spadku wydajności rekombinacji ekscytonu [99].

Wpływ stałego zewnętrznego pola elektrycznego, na sferycznie symetryczne kropki kwantowe, opisany został m.in. w pracach [100, 101]. Grupa Jansensa [102] zbadała teoretycznie efekt Starka w prostopadłym do płaszczyzny kropki stałym polu elektrycznym dla ekscytonów w poprzecznych kropkach kwantowych pierwszego i drugiego rodzaju, a także w podwójnych kropkach kwantowych obu rodzajów ustawionych jedna nad drugą (ang. *vertically coupled quantum dots*). Otrzymana przez tę grupę zależność energii ekscytonu od przyłożonego pola elektrycznego jest kwadratowa tylko dla kropek pierwszego rodzaju. Dla kropek drugiego rodzaju zależność ta jest niemalże liniowa.

Kropkami w bocznym polu elektrycznym zajmowała się grupa Jacaka, która analizowała efekty związane z bocznym polem elektrycznym w płaskiej kropce o potencjale parabolicznym [103], grupa Hellera [104], która badała eksperymentalnie wpływ bocznego pola elektrycznego na stany ekscytonowe w „naturalnej” kropce kwantowej (tj. kropce utworzonej na skutek fluktuacji

grubości studni kwantowej — porównaj podrozdział 1.1) oraz grupa Yakimova [105], która zbadała eksperymentalnie efekt Starka w kropkach kwantowych drugiego rodzaju utworzonych z Ge/Si. Gaussowskie kropki drugiego rodzaju w silnym bocznym polu elektrycznym były tematem pracy [106].

W niniejszym rozdziale przeanalizujemy wpływ stałego, jednorodnego bocznego pola elektrycznego, na stan podstawowy ekscytonu w gaussowskiej kropce kwantowej drugiego rodzaju. Do opisu ekscytonu w kropce użyjemy przybliżenia Hartree i formalizmu masy efektywnej z podrozdziałów 3.1 i 3.3. Natomiast do wyznaczenia jednocząstkowych energii Hartree z równań (3.3) i (3.4), a także funkcji falowych Hartree elektronu i dziury, użyjemy metody wariacyjnej.

Ponieważ włączenie bocznego pola elektrycznego powoduje powstanie potencjału, który umożliwia cząstkom ucieczkę do nieskończoności, zagadnienie ekscytonu w kropce kwantowej, w polu elektrycznym, nie jest zagadnieniem stacjonarnym. Niemniej jednak, jeśli czas życia ekscytonu jest dostatecznie długi, zagadnienie można potraktować jako kwazistacjonarne i posłużyć się stacjonarnym równaniem Schrödingera

W kropce kwantowej drugiego rodzaju uwzględnienie możliwości ucieczki jednej z cząstek do nieskończoności jest szczególnie istotne, w porównaniu do kropek pierwszego rodzaju, ponieważ jeden z nośników ładunku (np. dziura) jest przez kropkę odpychany, a jego wiązanie w ekscytonie wywołane jest tylko przyciąganiem kulombowskim nośnika o przeciwnym znaku ładunku elektrycznego (elektronu). Zjawisko ucieczki cząstki (tunelowania przez barierę potencjału) będzie tematem podrozdziału 7.4.

## 7.1 Stałe pole elektryczne

Po przyłożeniu stałego zewnętrznego pola elektrycznego  $\mathbf{E}$  energia cząstki o ładunku  $q$  zmieni się o  $q\varphi(\mathbf{r})$ , gdzie  $\varphi(\mathbf{r})$  jest potencjałem elektrostatycznym tego pola. Ponieważ  $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ , dla stałego i jednorodnego pola elektrycznego mamy  $\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}$ . Zatem nowy, pochodzący od pola elektrycznego wyraz, który musimy uwzględnić w hamiltonianach cząstek (3.5) i (3.6), ma postać

$$\mp q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}, \tag{7.1}$$

gdzie, z uwagi na znaki ładunków elektrycznych nośników, minus odnosi się do dziury, a plus do elektronu. Jeśli nowy człon wstawimy do potencjałów

Hartree (3.7) i (3.8) będą one miały postać

$$\mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e) = V_e(\mathbf{r}_e) + q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_e - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_h, \quad (7.2)$$

$$\mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h) = V_h(\mathbf{r}_h) - q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_h - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e. \quad (7.3)$$

podczas, gdy same wzory (3.5) i (3.6) nie ulegną zmianie.

## 7.2 Opis i rachunki Hartree

W zerowym rzędzie rachunku Hartree znika człon opisujący oddziaływanie elektron-dziura i dla elektronu znajdującego się w gaussowskiej kropce kwantowej potencjał (7.2) przyjmuje postać

$$\mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e) = -V_0 \exp\left(-\frac{\rho_e^2}{L^2}\right) + q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_e. \quad (7.4)$$

Dla dużych kropek, dla których funkcja falowa elektronu jest zlokalizowana w środku kropki, tak że  $\rho_e^2/L^2 \ll 1$ , możemy rozwinąć funkcję wykładniczą w szereg

$$\exp\left(-\frac{\rho_e^2}{L^2}\right) \approx 1 - \frac{\rho_e^2}{L^2} + \dots$$

i, uwzględniając tylko dwa pierwsze wyrazy tego rozwinięcia, zapisać potencjał Hartree elektronu jako

$$\mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e) = \frac{V_0}{L^2} (\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_0)^2 - V_0 - \frac{q^2 L^2}{4V_0} E^2, \quad (7.5)$$

gdzie

$$\mathbf{r}_0 = \frac{qL^2}{2V_0} \mathbf{E}. \quad (7.6)$$

Dla takiego potencjału możemy zamodelować funkcję falową w postaci

$$\psi_e(\mathbf{r}_e) = A_e \exp\left[-\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2} (\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_0)^2\right], \quad (7.7)$$

gdzie  $\beta_e$  to parametr wariacyjny, stała normalizacji

$$A_e = \frac{\sqrt{\beta_e}}{\sqrt{\pi}\lambda_0}, \quad (7.8)$$

a wielkości  $\lambda_0$  i  $\omega_0$  dane są wzorami (1.3) i (1.2).

Wyznamy teraz zależność parametru  $\beta_e$  minimalizującego energię elektronu od bocznego pola elektrycznego oraz od rozmiaru kropki gaussowskiej, który w naszym modelu kontrolowany jest za pomocą parametru  $\alpha$  (zobacz podrozdział 1.4).

Energia elektronu dana jest przez

$$\int \psi_e^* \hat{\mathcal{H}}_e \psi_e d\mathbf{r}_e, \quad (7.9)$$

gdzie

$$\hat{\mathcal{H}}_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e), \quad (7.10)$$

potencjał  $\mathcal{U}_e$  dany jest wzorem (7.4), a funkcja falowa elektronu wzorem (7.7). Rachunek wariacyjny (dodatek B.1) prowadzi do zależności energii od parametru  $\beta_e$  w postaci (B.2). Sam parametr  $\beta_e$ , wyznaczany z warunku (B.3), przyjmuje postać (B.4) dla  $0 < \alpha < 1$  (przypadek dużych i średnich kropek).

Mając daną funkcję falową elektronu (7.7), możemy wyliczyć całkę obecną we wzorze (7.3) na potencjał Hartree dziury. W tym przypadku można ją wyliczyć analitycznie. Wynosi ona

$$\int \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e = \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \exp\left[-\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2}(\mathbf{r}_h + \mathbf{r}_0)^2\right] I_0\left[\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2}(\mathbf{r}_h + \mathbf{r}_0)^2\right],$$

gdzie  $I_0$  to funkcja Bessela zerowego rzędu. Potencjał Hartree dziury przyjmuje teraz postać

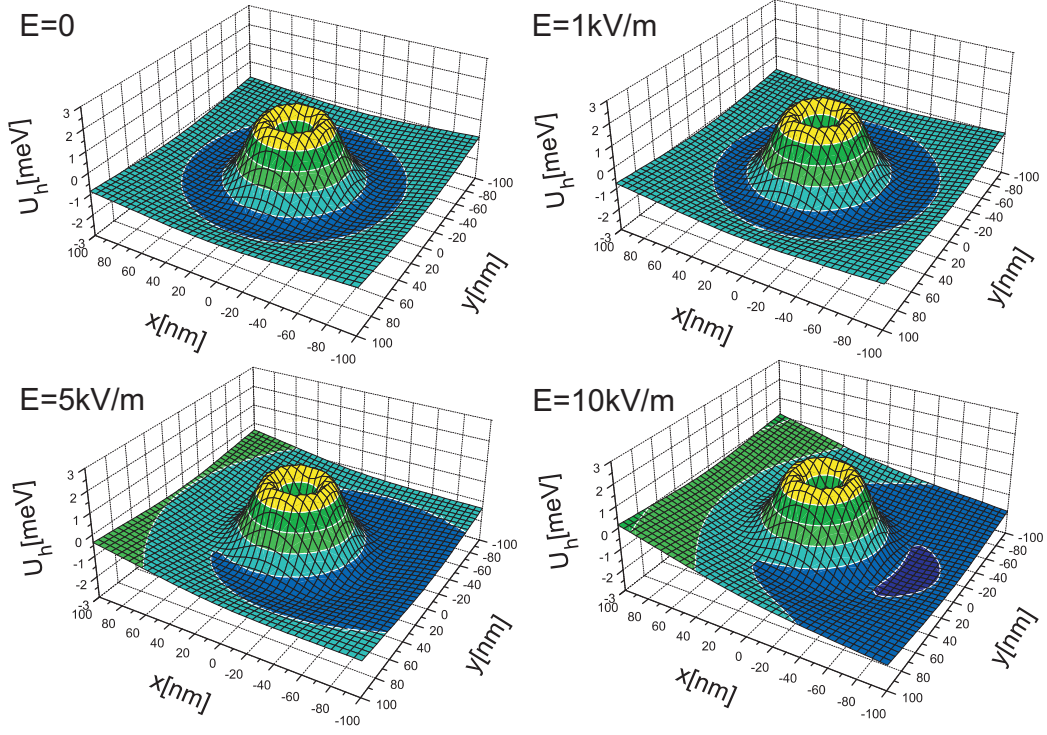
$$\begin{aligned} \mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h) = & V_0 \exp\left(-\frac{\rho_h^2}{L^2}\right) - \frac{2V_0}{L^2} \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r}_h \\ & - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \exp\left[-\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2}(\mathbf{r}_h + \mathbf{r}_0)^2\right] I_0\left[\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2}(\mathbf{r}_h + \mathbf{r}_0)^2\right], \end{aligned}$$

a przejście do układu odniesienia, w którego centrum znajduje się elektron,  $\mathbf{r}'_h = \mathbf{r}_h + \mathbf{r}_0$ , pozwala zapisać powyższy wzór w nowej formie

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h) = & V_0 \exp\left[-\frac{(\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_0)^2}{L^2}\right] - \frac{2V_0}{L^2} \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r}_h + \frac{2V_0}{L^2} \rho_0^2 \\ & - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \exp\left(-\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2} \rho_h^2\right) I_0\left(\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2} \rho_h^2\right), \end{aligned} \quad (7.11)$$

gdzie opuściliśmy znak prim przy współrzędnych dziury.

Potencjał ten, dla wartości parametrów  $\alpha = 0,4$ ,  $\hbar\omega_0 = 5$  meV,  $\epsilon = 12$  i pola elektrycznego skierowanego w stronę ujemnych x-ów, tj.  $\mathbf{E} = (-E, 0, 0)$ ,



Rysunek 7.1: Potencjał Hartree dziury dla czterech wartości bocznego pola elektrycznego. Wartości parametrów użyte w obliczeniach to  $\alpha = 0,4$ ,  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$  i  $\epsilon = 12$ , a wektor pola elektrycznego zwrócony jest w stronę ujemnych x-ów.

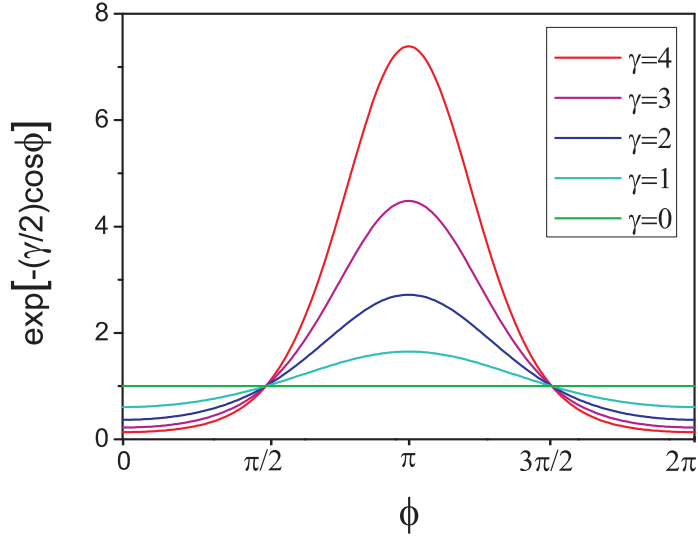
zilustowany został na rysunku 7.1. W zerowym polu elektrycznym posiada on symetrię kołową, która w dobrym przybliżeniu zachowana jest do wartości pola  $\sim 1 \text{ kV/m}$ . Dla pola elektrycznego 5 i 10 kV/m minimum potencjału znajduje się już tylko po jednej stronie kropki kwantowej. Minimum to znika całkowicie w polu o wartości około 14 kV/m.

Dla potencjału danego wzorem (7.11) postulujemy wariacyjną funkcję falową w postaci

$$\psi_h(\mathbf{r}_h) = A_h \rho_h \exp \left[ -\frac{\beta_h}{2\lambda_0^2} (\rho_h - \rho_m)^2 \right] \exp \left( -\frac{\gamma}{2} \cos \varphi_h \right), \quad (7.12)$$

gdzie  $\beta_h$  oraz  $\gamma$  to parametry wariacyjne,  $\rho_m$  to odległość minimum potencjału od środka układu współrzędnych dla  $\varphi_h = \pi$  (minimum to przestaje istnieć dla pewnej wartości pola elektrycznego). Stała normalizacji

$$A_h = \left\{ \frac{\pi}{2} \left( \frac{\lambda_0^2}{\beta_h} \right)^2 I_0(\gamma) \left[ e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} \zeta (1 + \Phi(\zeta)) \right] \right\}^{-1/2}, \quad (7.13)$$



Rysunek 7.2: Część kątowna funkcji falowej dziury dla kilku różnych wartości parametru wariacyjnego  $\gamma$ .

gdzie

$$\zeta = \sqrt{\beta_h} \frac{\rho_m}{\lambda_0}, \quad (7.14)$$

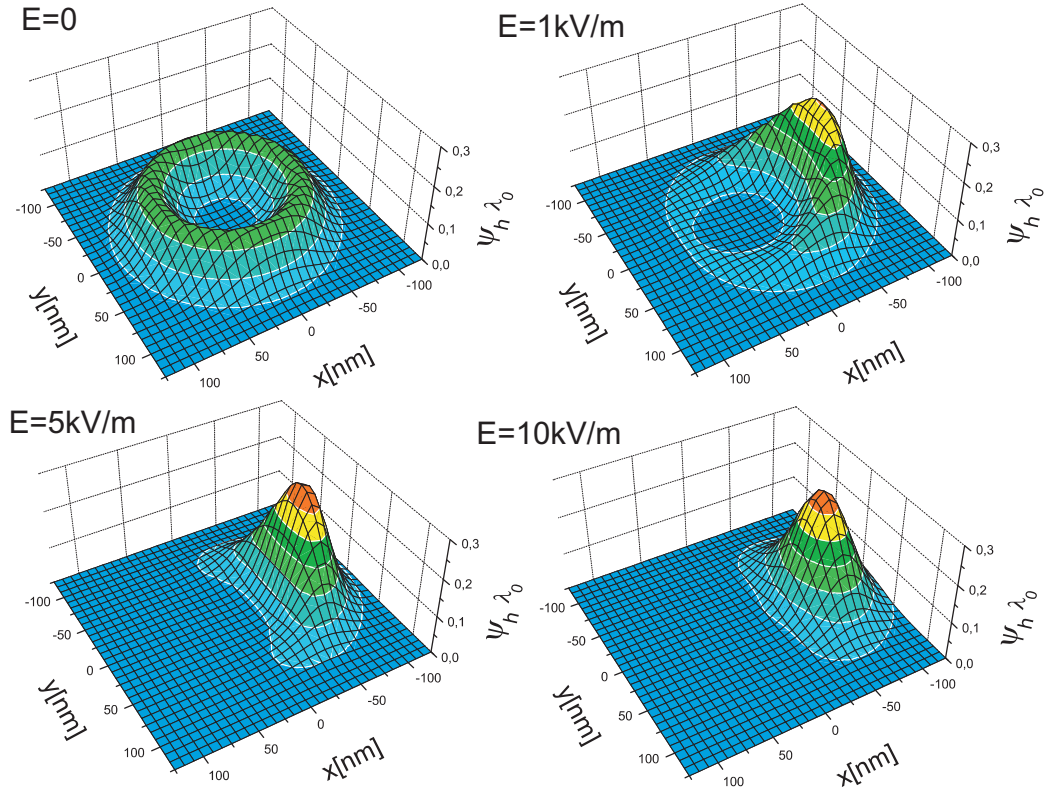
a  $\Phi$  to funkcja błędu zdefiniowana w następujący sposób

$$\Phi(\zeta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\zeta e^{-x^2} dx.$$

Część kątowna funkcji (7.12) przedstawiona została na rysunku 7.2 dla kilku różnych wartości parametru wariacyjnego  $\gamma$ . Cała funkcja falowa, powstała przez przemnożenie tej części kątownej przez przesunięty gaussian, jest z dobrym przybliżeniem symetryczna tylko dla  $\gamma \ll 1$ .

Podobnie jak w przypadku elektronu, znajdziemy zależność energii dziury od parametrów  $\beta_h$  i  $\gamma$ , a następnie wyznaczymy parametry  $\beta_h$  oraz  $\gamma$ , które tę energię minimalizują (dodatek B.2).

Rysunek 7.3 przedstawia funkcję falową dziury dla czterech wartości bocznego pola elektrycznego i parametrów kropki  $\hbar\omega_0 = 5$  meV,  $\alpha = 0,4$  (średnia kropka). Bez pola elektrycznego  $\gamma = 0$  i funkcja falowa dziury jest kołowo symetryczna. W polu elektrycznym 1 kV/m funkcja ta traci symetrię i dziura w większej części znajduje się po stronie niższego potencjału. W większych polach 5 – 10 kV/m funkcja falowa dziury jest skoncentrowana tylko po jednej stronie kropki. Dla wyższych pól elektrycznych ( $E > 14$  kV/m) minimum potencjału Hartree przestaje istnieć i dziura nie może zostać związana.



Rysunek 7.3: Funkcja falowa dziury dla czterech wartości bocznego pola elektrycznego. Wartości parametrów użyte w obliczeniach to  $\alpha = 0, 4$ ,  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ ,  $\epsilon = 12$  i  $\lambda_0 = 14 \text{ nm}$ , a wektor pola elektrycznego zwrócony jest w stronę ujemnych x-ów. (Funkcja falowa na rysunku pomnożona została przez stałą, dla danej wielkości kropki, długość charakterystyczną  $\lambda_0$ .)

W następnym kroku chcemy wyliczyć całkę ze wzoru (7.2), przy czym będzie nas interesował wynik tylko w niewielkim obszarze, w którym znajduje się elektron.

Korzystając z dwóch pierwszych członów rozwinięcia

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} = \frac{1}{\rho_h} + \frac{\mathbf{r}_e \cdot \mathbf{r}_h}{\rho_h^3} + \dots$$

dla małych  $|\mathbf{r}_e|$  przybliżymy całkę występującą we wzorze (7.2) w następujący sposób

$$\int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_h \approx \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{\rho_h} d\mathbf{r}_h + \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2 \mathbf{r}_e \cdot \mathbf{r}_h}{\rho_h^3} d\mathbf{r}_h = S_1 + S_2. \quad (7.15)$$

Podstawiając funkcję falową dziury otrzymujemy

$$\begin{aligned} S_1 &= A_h^2 \int_0^{2\pi} e^{-\gamma \cos \varphi_h} d\varphi_h \int_0^\infty \rho_h^2 e^{-\beta_h(\rho_h - \rho_m)^2 / \lambda_0^2} d\rho_h \\ &= A_h^2 2\pi I_0(\gamma) \frac{\lambda_0^3}{4\beta_h^{3/2}} \left\{ 2\zeta e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} (1 + 2\zeta^2) [1 + \Phi(\zeta)] \right\} \end{aligned} \quad (7.16)$$

gdzie  $\zeta$  dane jest wzorem (7.14). Następnie, rozpisując iloczyn skalarny

$$\mathbf{r}_e \cdot \mathbf{r}_h = x_e x_h + y_e y_h = x_e \rho_h \cos \varphi_h + y_e \rho_h \sin \varphi_h,$$

dostajemy

$$\begin{aligned} S_2 &= A_h^2 \int_0^\infty \rho_h e^{-\beta_h(\rho_h - \rho_m)^2 / \lambda_0^2} d\rho_h \times \\ &\quad \left\{ x_e \int_0^{2\pi} \cos \varphi_h e^{-\gamma \cos \varphi_h} d\varphi_h + y_e \int_0^{2\pi} \sin \varphi_h e^{-\gamma \cos \varphi_h} d\varphi_h \right\}. \end{aligned}$$

Pierwsza całka po kącie daje  $-2\pi I_1(\gamma)$ , natomiast druga jest równa zeru. Wyliczając całkę po  $\rho_h$  dostajemy ostatecznie

$$S_2 = -A_h^2 2\pi I_1(\gamma) \frac{\lambda_0^2}{2\beta_h} \left\{ e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} \zeta [1 + \Phi(\zeta)] \right\} x_e. \quad (7.17)$$

Możemy teraz zapisać

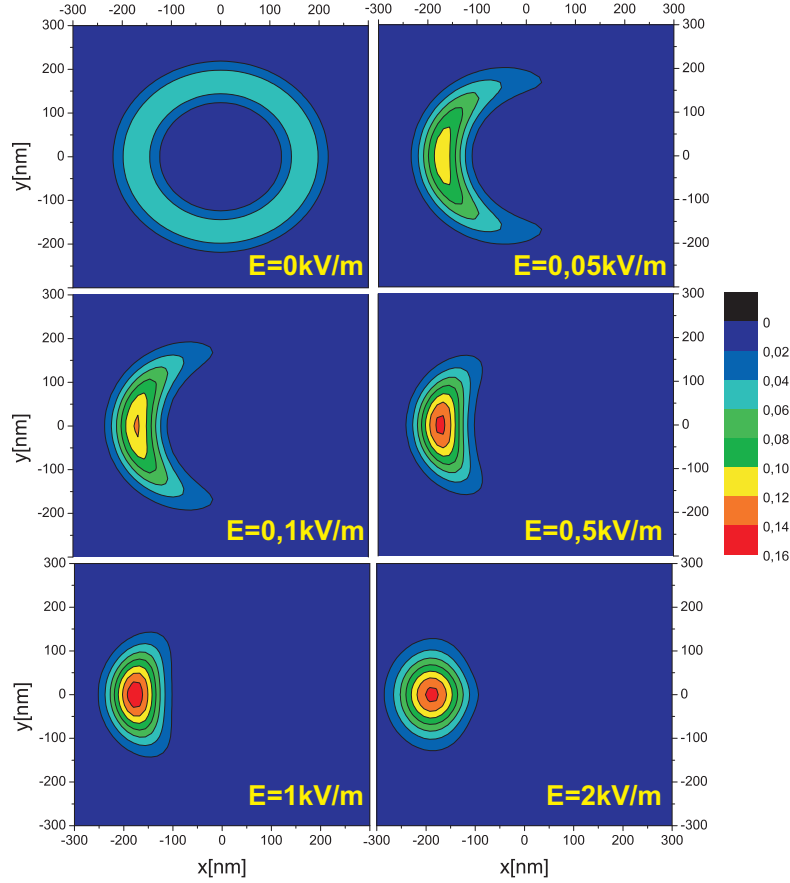
$$-\frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_h = q\mathbf{E}_d \cdot \mathbf{r}_e + \Delta\epsilon_e,$$

gdzie, na podstawie wzorów (7.15), (7.16) oraz (7.17), wielkości  $\Delta\epsilon_e$  i  $\mathbf{E}_d$  wynoszą

$$\begin{aligned} \Delta\epsilon_e &= -\frac{q^2 A_h^2 \lambda_0^3 I_0(\gamma)}{8\epsilon\epsilon_0 \beta_h^{3/2}} \left\{ 2\zeta e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} (1 + 2\zeta^2) [1 + \Phi(\zeta)] \right\}, \\ \mathbf{E}_d &= \frac{q A_h^2 \lambda_0^2 I_1(\gamma)}{4\epsilon\epsilon_0 \beta_h} \left\{ e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} \zeta [1 + \Phi(\zeta)] \right\} \hat{\mathbf{x}}. \end{aligned}$$

Tak więc oddziaływanie z dziurą zastępujemy, w dużej odległości, w niewielkim obszarze, który zajmuje elektron, oddziaływaniem ze stałym polem elektrycznym  $\mathbf{E}_d$  (plus przesunięcie energii  $\Delta\epsilon_e$ ). Przybliżenie to może być stosowane, tylko wtedy, kiedy długość charakterystyczna elektronu  $\lambda_0/\sqrt{\beta_e}$

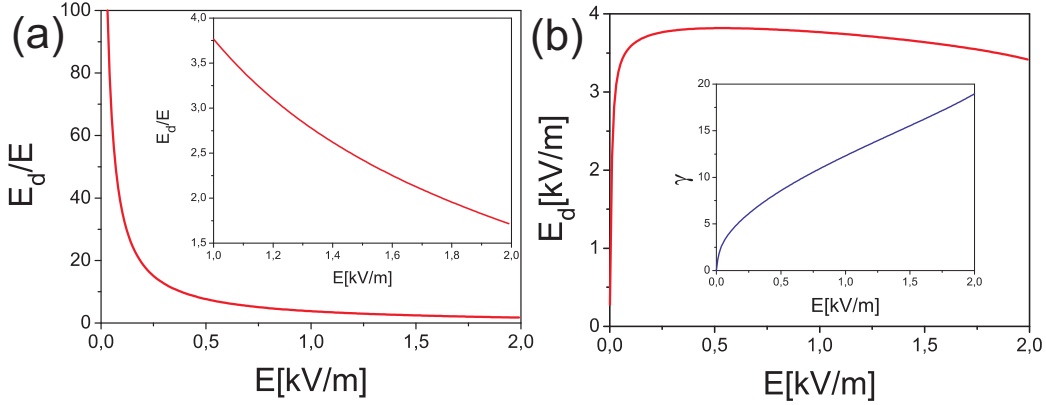




Rysunek 7.4: Funkcja falowa dziury dla sześciu różnych wartości bocznego pola elektrycznego. Wartości parametrów użyte w obliczeniach to  $\alpha = 0,1$ ,  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ ,  $\epsilon = 12$ .

jest dużo mniejsza od  $(\rho_m - \lambda_0/\sqrt{\beta_h})$ , czyli od odległości minimum potencjału dziury pomniejszonej o długość charakterystyczną funkcji falowej dziury<sup>1</sup>. Warunek ten jest spełniony np. dla  $\alpha = 0,1$  i  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$  (i wszystkich mniejszych  $\alpha$  przy tej wartości  $\hbar\omega_0$ ). Dla takich wartości parametrów  $\alpha$  oraz  $\hbar\omega_0$  funkcja falowa dziury została zilustrowana na rysunku 7.4. Jak można łatwo zauważyć, dla dużych kropek, dla których  $\alpha \leq 0,1$ , nawet niewielkie boczne pole elektryczne powoduje przesunięcie funkcji falowej dziury całkowicie w stronę niższego potencjału — dziura w dużej kropce drugie-

<sup>1</sup> Ponieważ funkcja falowa dziury jest gaussianem mnożonym przez  $\rho$ , ściśle rzecz biorąc  $\lambda_0/\sqrt{\beta_h}$  nie będzie jej długością charakterystyczną. Unormowana funkcja o takiej postaci będzie jednak maleć szybciej w kierunku malejących  $\rho$ , a jej maksimum przesunie się w stronę większych  $\rho$ , co dodatkowo poprawia dokładność w stosunku do naszego oszacowania.



Rysunek 7.5: (a) Stosunek wartości pól elektrycznych  $E_d$  i  $E$  w zależności od wartości przyłożonego pola  $E$ . (b) Zależność wartości pola  $E_d$  od wartości przyłożonego pola elektrycznego  $E$  (Wkładka: zależność parametru wariacyjnego  $\gamma$  od wartości przyłożonego pola). Wartości parametrów użyte w obliczeniach to  $\alpha = 0.1$ ,  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ ,  $\epsilon = 12$ .

go rodzaju jest więc bardzo podatna na sterowanie bocznymi polami rzędu ułamka kV/m.

Ponieważ pole  $\mathbf{E}_d$  jest skierowane w przeciwną stronę niż pole  $\mathbf{E} = (-E, 0, 0)$ , a jego wartość, w przypadku dużych kropek kwantowych ( $\alpha = 0.1$ ,  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ ), przewyższa wartość pola elektrycznego  $E$  (rysunek 7.5), elektron, w takiej kropce, zostanie przesunięty w stronę ujemnych x-ów<sup>2</sup>.

Skoro wiemy już, że elektron przemieści się z centrum kropki w stronę dziury (stronę ujemnych x-ów) możemy wrócić do zerowego rzędu rachunku Hartree (gdzie pod nieobecność dziury, elektron był przesunięty w stronę dodatnich x-ów) i przyjąć funkcję falową elektronu nieprzesuniętą<sup>3</sup> — pozwoli nam to efektywniej (w takiej samej liczbie kroków Hartree) wyznaczyć funkcje falowe i energie elektronu i dziury w zewnętrznym polu elektrycznym w przypadku dużych kropek.

Po powtórzeniu obliczeń z nieprzesuniętą funkcją falową elektronu w zerowym rzędzie rachunku Hartree, i funkcją dziury, możemy wyznaczyć funkcję falową elektronu w pierwszym rzędzie.

<sup>2</sup> Pole  $\mathbf{E}_d$  wyznaczyliśmy w miejscu przesuniętym o  $\mathbf{r}_0$  od środka kropki, ale przesunięcie to jest tak małe w przypadku dużych kropek kwantowych w stosunku do odległości pomiędzy elektronem i dziurą, że możemy je pominąć i porównywać pola „w centrum kropki”. (Przesunięcie to, dla parametrów  $\alpha = 0, 1$  i  $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ , dla których będziemy dalej wykonywać obliczenia, wynosi  $\sim 0, 08 \text{ nm}$  dla największego pola, dla którego istnieje jeszcze minimum potencjału dziury.)

<sup>3</sup> W naszych obliczeniach (dodatek B.1) wystarczy położyć  $\mathbf{r}_0 = 0$  w funkcji falowej (7.7) i wszędzie tam, gdzie przesunięcie to pochodzi z całkowania tej funkcji.

Ponieważ potencjał Hartree dla elektronu w pierwszym rzędzie, w układzie związanym z kropką kwantową, będzie miał w naszym przybliżeniu postać

$$\mathcal{U}_e(\mathbf{r}_e) = -V_0 \exp\left(-\frac{\rho_e^2}{L^2}\right) + q(\mathbf{E} + \mathbf{E}_d) \cdot \mathbf{r}_e + \Delta\varepsilon_e, \quad (7.18)$$

dla funkcji falowej elektronu, używając rozwinięcia (7.5), otrzymamy przesunięcie od środka kropki kwantowej

$$\mathbf{r}_1 = \frac{qL^2}{2V_0}(\mathbf{E} + \mathbf{E}_d)$$

analogiczne do (7.6). Funkcję falową elektronu postulujemy w postaci przesuniętego gaussianu

$$\psi_{1e}(\mathbf{r}_e) = A_{1e} \exp\left[-\frac{\beta_{1e}}{2\lambda_0^2}(\mathbf{r}_e + \mathbf{r}_1)^2\right] \quad (7.19)$$

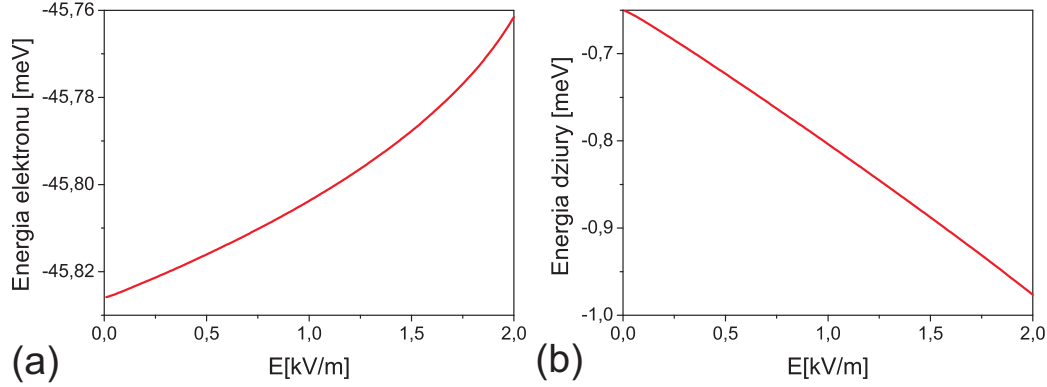
i powtarzamy procedurę wariacyjną, z której korzystaliśmy w zerowym rzędzie rachunku Hartree — wyznaczamy parametr wariacyjny  $\beta_{1e}$ , który minimalizuje energię elektronu, a następnie samą energię.

W następnym kroku możemy w taki sam sposób, jak w pierwszym rzędzie rachunku Hartree, wyznaczyć energię  $\varepsilon_{2h}$  i funkcję falową dziury, która w układzie przesuniętym o  $\mathbf{r}_1$  od środka kropki ma postać (pomijamy primy)

$$\psi_{2h}(\mathbf{r}_h) = A_{2h}\rho_h \exp\left[-\frac{\beta_{2h}}{2\lambda_0^2}(\rho_h - \rho_{2m})^2\right] \exp\left(-\frac{\gamma_{2h}}{2} \cos \varphi_h\right) \quad (7.20)$$

ze stałą normalizacji  $A_{2h}$  analogiczną do (7.13).

Energie elektronu i dziury, w zależności od bocznego pola elektrycznego, przedstawione zostały na rysunku 7.6. Energia elektronu 7.6(a) rośnie wraz z przyłożonym polem, ale wzrost ten jest bardzo niewielki. Dziura natomiast, ze względu na fakt, że jest słabo związana, jest bardzo podatna na przyłożone boczne pole elektryczne. Dla dużych kropek kwantowych parametr  $\gamma$  będący miarą asymetrii jej funkcji falowej, rośnie szybko już w polu elektrycznym o małym natężeniu, co ilustruje rysunek 7.5(b), i dziura znajduje się całkowicie po stronie niższego potencjału pola. Energia dziury 7.6(b) zmienia się więc znacznie szybciej niż energia elektronu, przez co jej wkład do zmiany energii ekscytonu będzie dominujący.



Rysunek 7.6: Energia elektronu w pierwszym rzędzie rachunku Hartree (a) oraz energia dziury w drugim rzędzie rachunku Hartree (b) w zależności od natężenia zewnętrznego, bocznego pola elektrycznego. Parametry kropki to  $\alpha = 0,1$  (wtedy  $L = 63$  nm),  $\hbar\omega_0 = 5$  meV i  $\epsilon = 12$ .

### 7.3 Energia ekscytonu

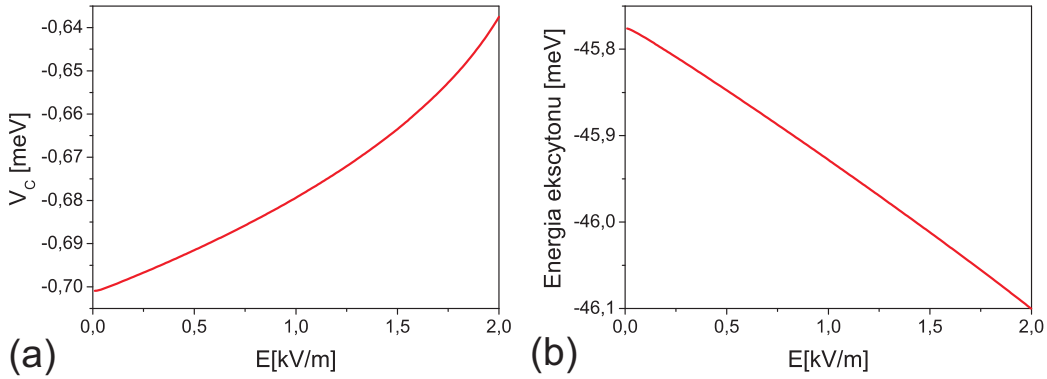
W celu wyznaczenia energii ekscytonu w przybliżeniu Hartree (3.9) musimy jeszcze policzyć oddziaływanie kulombowskie

$$V_C = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \frac{|\psi_{1e}(\mathbf{r}_e)|^2 |\psi_{2h}(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h. \quad (7.21)$$

Robimy to w następujący sposób. Najpierw liczymy całkę po współrzędnych dziury  $\mathbf{r}_h$  korzystając z przybliżenia wprowadzonego w tym podrozdziale, a następnie liczymy całkę po współrzędnych elektronu w taki sam sposób jak w przypadku członu  $A_3$  ze wzoru (B.1) na energię elektronu (zobacz dodatek B.1).

Tę samą energię otrzymujemy jako składnik energii dziury  $\epsilon_{2h}$  (człon z całką Hartree odpowiedzialny za oddziaływanie z elektronem) i jako energię oddziaływania kulombowskiego — w przybliżeniu Hartree we wzorze na energię ekscytonu (3.9) dwa razy liczymy energię kulombowską (raz dla elektronu i drugi raz dla dziury) dlatego, o czym była mowa w podrozdziale 3.3, musimy ją na końcu odjąć, żeby otrzymać energię ekscytonu. Z tego powodu wkład od członu opisującego oddziaływanie dziury z elektronem do energii ekscytonu (jako część  $\epsilon_{2h}$ ) znosi się z odejmowaną energią kulombowską. Niemniej jednak energia  $\epsilon_{2h}$  różni się od energii  $\epsilon_h$  ze względu na zmianę parametrów wariacyjnych  $\beta$  i  $\gamma$ .

Rysunek 7.7 przedstawia zależność energii oddziaływania kulombowskiego (a) oraz energii ekscytonu (b) od bocznego, zewnętrznego pola elektrycz-



Rysunek 7.7: (a) Energia oddziaływania kulombowskiego elektronu i dziury w zależności od natężenia pola elektrycznego. (b) Niemalże liniowa zależność energii ekscytonu od wartości bocznego pola. Parametry kropki to  $\alpha = 0,1$  (wtedy  $L = 63$  nm),  $\hbar\omega_0 = 5$  meV i  $\epsilon = 12$ .

nego. Wartość bezwzględna energii oddziaływania maleje na skutek rozseparowania przez boczne pole elektryczne nośników ładunku. Energia ekscytonu natomiast maleje wraz z przyłożonym polem tzn. jej wartość staje się coraz bardziej ujemna.

Energia fotoluminescencji, czyli

$$E_{PL} = E_g + E,$$

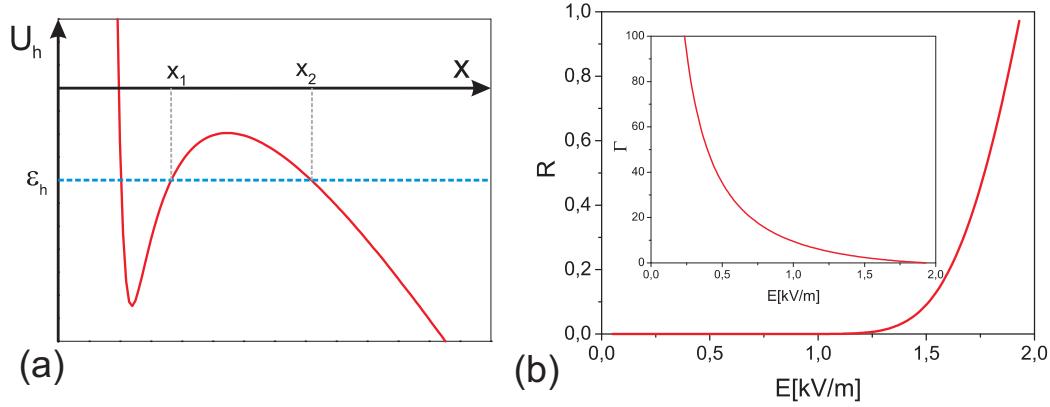
gdzie  $E_g$  to energia przerwy energetycznej, a  $E < 0$  to energia ekscytonu, będzie więc wraz ze wzrostem bocznego pola malała. Jej zależność od pola nie będzie jednak kwadratowa, lecz, tak jak w przypadku kropek drugiego rodzaju w prostopadłym do płaszczyzny kropki polu elektrycznym [102], niemalże liniowa.

Na koniec należałoby zwrócić uwagę na fakt, że nawet bardzo słabe pole elektryczne powinno usuwać z widma cylindrycznie symetrycznej kropki kwantowej potencjalnie możliwe do zaobserwowania piki związane z omawianymi w rozdziale 5 stanami metastabilnymi.

## 7.4 Tunelowanie

W dowolnie słabym polu elektrycznym istnieje prawdopodobieństwo, że dziura przejdzie przez barierę potencjału i oddali się do nieskończoności.

Analogiczna sytuacja ma miejsce dla elektronu, ale ze względu na fakt, że rozpatrywana przez nas kropka drugiego rodzaju przyciąga elektron, jednocześnie odpychając dziurę (która jest związana tylko przyciąganiem kulom-



Rysunek 7.8: (a) Tunelowanie przez jednowymiarową barierę potencjału. (b) Zależność współczynnika tunelowania od wartości bocznego pola elektrycznego (Wkładka: logarytm naturalny z  $R$  ze znakiem minus). Parametry kropki to  $\alpha = 0,1$  (wtedy  $L = 63$  nm),  $\hbar\omega_0 = 5$  meV i  $\epsilon = 12$ .

bowskim elektronu), bariera, którą musi pokonać dziura jest o wiele mniejsza od bariery dla elektronu.

Wykorzystamy teraz metodę WKB do obliczenia prawdopodobieństwa przejścia tunelowego dziury, w przybliżeniu jednowymiarowym — nasze rozważania ograniczamy do przybliżenia jednowymiarowego ze względu na fakt, że tunelowanie przez dwuwymiarową barierę jest bardzo złożonym zagadnieniem.

Ponieważ pole elektryczne zwrócone jest w stronę ujemnych  $x$ -ów będziemy rozpatrywać przekrój potencjału Hartree dziury  $\mathcal{U}_h$  przez oś  $x$ -ów. W takim przypadku półklasyczne oszacowanie daje prawdopodobieństwo ucieczki dziury na jednostkę czasu

$$R \sim \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m_h [\mathcal{U}_h(x) - \epsilon_h]} dx\right) \equiv e^{-\Gamma}, \quad (7.22)$$

a znaczenie wielkości  $x_1, x_2$  ilustruje rysunek 7.8(a). Średni czas życia w tym przybliżeniu wynosi  $\tau = 1/R$ .

Współczynnik  $R$ , dla parametrów kropki  $\alpha = 0,1$  (wtedy  $L = 63$  nm),  $\hbar\omega_0 = 5$  meV, został przedstawiony na rysunku 7.8(b). Jak widać przybiera on już stosunkowo duże wartości, dla pól  $\sim 1,5$  kV/m i jest równy jedności dla pól nieco mniejszych od 2 kV/m (minimum potencjału Hartree dziury przestaje istnieć dopiero dla pól  $\sim 2,5$  kV/m).

## 7.5 Indukowany moment dipolowy

Znajdziemy teraz moment dipolowy ekscytonu indukowany przez boczne pole elektryczne w kropce gaussowskiej drugiego rodzaju.

Ponieważ średnia odległość między nośnikami  $\mathbf{d} = \langle \mathbf{r}_h - \mathbf{r}_e \rangle = \langle \mathbf{r}_h \rangle - \langle \mathbf{r}_e \rangle$  może być zapisana jako

$$\mathbf{d} = \int |\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2 \mathbf{r}_h d\mathbf{r}_h - \int |\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2 \mathbf{r}_e d\mathbf{r}_e,$$

indukowany moment dipolowy równy jest

$$\mathbf{p} = q\mathbf{d} = q \int |\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2 \mathbf{r}_h d\mathbf{r}_h - q \int |\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2 \mathbf{r}_e d\mathbf{r}_e. \quad (7.23)$$

Jako iż średnia odległość pomiędzy nośnikami ładunku rośnie wraz ze wzrostem wartości przyłożonego bocznego pola elektrycznego, rosnać będzie także bezwzględna wartość momentu dipolowego stanu podstawowego ekscytonu.

Ze względu na symetrię układu, w polu elektrycznym skierowanym w kierunku x składowa y-owa wyrażenia (7.23) znika, a składowa x-owa wynosi

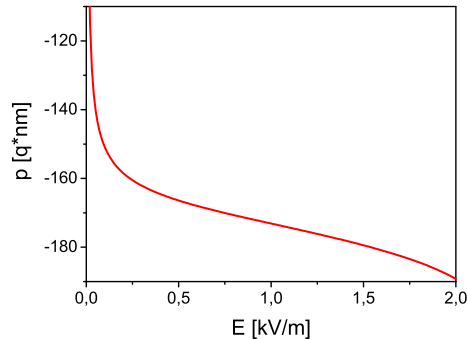
$$p_x = q \int |\psi(\mathbf{r}_h)|^2 \rho_h \cos \varphi_h d\mathbf{r}_h - q \int |\psi(\mathbf{r}_e)|^2 \rho_e \cos \varphi_e d\mathbf{r}_e.$$

Obliczenia wykonamy w układzie związanym z elektronem. Podstawiając do powyższego wzoru funkcję falową dziury, daną przez (7.20) i funkcję falową elektronu (7.19) (z  $\mathbf{r}_1 = 0$ ), dostajemy dla dziury całkę analogiczną do całki z elementu  $D_3$  w dodatku B.2, a całka po  $\mathbf{r}_e$ , ze względu na symetrię, daje zero. Ostatecznie wyrażenie na składową x-ową indukowanego elementu dipolowego ma postać

$$p_x = -\frac{q\pi I_1(\gamma) A_h^2 \lambda_0^5}{2\beta_h^{5/2}} \left[ \zeta (5 + 2\zeta^2) e^{-\zeta^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} (3 + 12\zeta^2 + 4\zeta^4) (1 + \Phi(\zeta)) \right] \quad (7.24)$$

gdzie  $\zeta$  dane jest za pomocą wzoru (7.14).

Zależność składowej x-owej indukowanego momentu dipolowego  $p_x$  stanu podstawowego ekscytonu, od bocznego pola elektrycznego przedstawiona została na rysunku 7.9. Na początku, dla bardzo małych pól elektrycznych, wartość bezwzględna momentu dipolowego gwałtownie rośnie. Jest to spowodowane czułością funkcji falowej dziury na przyłożone pole — parametr  $\gamma$  w przypadku dużych kropek szybko rośnie i już dla stosunkowo małych pól przybiera duże wartości. Dla pól większych od około 0,2 kV/m wzrost ten zostaje zahamowany — funkcja falowa dziury praktycznie w całości znajduje się po stronie niższego potencjału i dalszy wzrost parametru  $\gamma$  nie wpływa już



Rysunek 7.9: Zależność indukowanego momentu dipolowego  $p_x$  (w jednostkach  $q \cdot nm$ , gdzie  $q$  to ładunek elementarny) stanu podstawowego ekscytonu w kropce kwantowej drugiego rodzaju, od bocznego pola elektrycznego dla parametrów kropki  $\alpha = 0, 1$  (wtedy  $L = 63$  nm),  $\hbar\omega_0 = 5$  meV i  $\epsilon = 12$ .

w znaczącym stopniu na rozseparowanie funkcji falowych elektronu i dziury. Niewielki wzrost wartości bezwzględnej momentu dipolowego, jaki ma miejsce dla pól większych od  $0,2$  kV/m, jest spowodowany wzrostem odległości radialnej minimum potencjału dziury  $\rho_m$  od punktu, w którym znajduje się środek funkcji falowej elektronu.

## 7.6 Podsumowanie

Rozdział ten zawiera analizę wpływu bocznego pola elektrycznego na ekscyton związany przez kropkę kwantową drugiego rodzaju. Energie i funkcje falowe ekscytonu z uwagi na fakt, że boczne pole elektryczne łamie symetrię osiową układu wyliczone zostały w tym przypadku nie przy użyciu metod numerycznych, lecz przy użyciu metod wariacyjnych. Nasze wyliczenia, ograniczone do przypadku dużych kropek kwantowych, dają w wyniku energię ekscytonu, która okazuje się zależeć niemalże liniowo od wartości przyłożonego bocznego pola. Oprócz energii ekscytonu i związanych z nią własności optycznych przeanalizowaliśmy także tunelowanie dziury z kropki, a także moment dipolowy ekscytonu indukowany przyłożonym polem.

Jak się okazało, ze względu na słabe wiązanie dziury w tych strukturach, duże kropki kwantowe drugiego rodzaju są szczególnie podatne na sterowanie polem elektrycznym o niewielkich wartościach, co czyni je potencjalnym przedmiotem przyszłych praktycznych zastosowań związanych z nanotechnologią i optoelektroniką.



## Rozdział 8

# Ekscyton związany przez zjonizowany donor oddalony od studni kwantowej

### 8.1 Analogia do kropek kwantowych drugiego rodzaju

W rozdziale tym przeanalizujemy możliwość związania ekscytonu przez zjonizowany donor oddalony od dwuwymiarowej studni kwantowej, w której znajdują się nośniki ładunku.

Zjonizowany donor oddalony od płaszczyzny studni, analogicznie jak kropka kwantowa drugiego rodzaju, przyciąga jeden rodzaj nośników ładunku (elektrony) i stanowi barierę dla drugiego rodzaju (dodatnio naładowanych dziur) dlatego możliwość związania ekscytonu przez jon  $D^+$ , tak jak w przypadku kropek kwantowych drugiego rodzaju, związana jest z przyciąganiem kulombowskim pomiędzy nośnikami. Ponadto donor oddalony od studni, w przeciwieństwie do donora nieoddalonego, wytwarza potencjał, który w płaszczyźnie studni pozbawiony jest osobliwości, a układ pasm w półprzewodniku zmodyfikowany jest w taki sam sposób jak w przypadku kropki kwantowej zadawanej polem elektrycznym — dla elektronu i dziury w płaszczyźnie studni mamy potencjał posiadający taki sam kształt, a różniący się jedynie znakiem. Co więcej, dla pewnych wartości odległości donora od studni  $d$ , potencjał ten bardzo przypomina studnię gaussowską, której używaliśmy do modelowania kropek kwantowych drugiego rodzaju. Z tego względu spodziewamy się, że tak jak w przypadku kropek gaussowskich, po związaniu elektronu przez zjonizowany donor, efektywny potencjał, jaki będzie odczuwała dziura (złożony z potencjału pochodzącego od donora i oddziaływania z elektronem), również

będzie charakteryzował się „pierścieniową” strukturą, a nośniki ładunku będą od siebie odseparowane. W związku z tym można się też spodziewać, że charakterystyczne dla kropek drugiego rodzaju zjawiska takie jak np. omówione w podrozdziale 6.3 oscylacje Aharonova-Bohma, mogą występować także i w tym układzie.

## 8.2 Istnienie stanów związanych na zjonizowanym donorze

Jednym z najprostszych kompleksów jaki może utworzyć się w półprzewodniku na zjonizowanym donorze  $D^+$  jest kompleks  $(D^+, X)$  w którym para elektron-dziura, czyli ekscyton  $X$ , zostaje związana przez jon  $D^+$ .

Możliwość istnienia kompleksu  $(D^+, X)$  została przewidziana przez Lamperta [107] w 1958 roku. Od tego czasu jego stabilność i energia wiązania, jako funkcja stosunku mas elektronu i dziury  $\sigma = m_e/m_h$ , była przedmiotem kilku teoretycznych prac w półprzewodnikach 3D [108, 109] i w dwuwymiarowych studniach kwantowych [109, 110].

W przypadku trójwymiarowym, Stauffer i Stébé, używając 55-wyrazowej funkcji typu Hylleraasa, otrzymali wynik, który wskazywał na to, że kompleks ekscytonowy jest stabilny dopóki  $\sigma < \sigma_{kryt}^{3D} = 0.365$  [109]. Skettrup ze współautorami, używając bardziej złożonych funkcji falowych, otrzymali ograniczenie na krytyczną wartość stosunku mas elektronu i dziury w postaci  $\sigma_{kryt}^{3D} = 0.426$  [108]. W przypadku dwuwymiarowym przekroczenia pomiędzy funkcjami falowymi składników kompleksu  $(D^+, X)$  stają się większe (ze względu na dodatkowe uwięzienie), a co za tym idzie rośnie energia wiązania. W związku z tym również zwiększa się stabilność w stosunku do struktur trójwymiarowych. Dlatego można się spodziewać, że obserwacja związanych ekscytonów będzie łatwiejsza w przypadku dwuwymiarowych studni niż w przypadku trójwymiarowego półprzewodnika.

W przypadku dwuwymiarowej studni Stauffer and Stébé, używając tej samej metody, co w przypadku trójwymiarowym, uzyskali ograniczenie na wartość stosunku mas w postaci  $\sigma_{kryt}^{2D} = 0.88$  [109]. Jednakże ostatnio, Ruan i Chang, używając „hipersferycznego rozwinięcia adiabaticznego” (ang. *hyperspherical adiabatic expansion approach*), pokazali, że kompleks  $(D^+, X)$  jest stabilny, w dwuwymiarowym przypadku, dla każdej wartości stosunku mas efektywnych w przedziale  $0 \leq \sigma \leq 1$ , podczas gdy dla  $1 \leq \sigma \leq \infty$  ujemnie naładowany jon akceptorowy  $A^-$  może związać ekscyton i kompleks  $(A^-, X)$  jest stabilny [110]. Xie i Gu używając podobnego podejścia analizowali zależność energii wiązania kompleksów  $(D^+, X)$  i  $(A^-, X)$  od sto-

sunku mas  $\sigma$  i siły potencjału w parabolicznych, dwuwymiarowych kropkach kwantowych [111]. Dla skończonej grubości studni Liu i współpracownicy [112], używając dwuparametrowej funkcji falowej, wyliczyli rachunkiem wariacyjnym energię wiązania ekscytonu związanego na zjonizowanym donorze, czyli kompleksu  $(D^+, X)$ , w studni GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As dla wartości grubości studni od 1 do 30 nm, kiedy donor jest zlokalizowany w centrum studni oraz na krawędzi studni. Ich teoretyczne rezultaty potwierdziły spekulacje Reynoldsa i współpracowników oparte na eksperymentach ze studniami GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As [113], że dodatkowe przejście w widmie fotoluminescencji jest związane z energią wiązania kompleksu  $(D^+, X)$  powstałego na domieszce zlokalizowanej na krawędzi studni. da Cunha Lima z zespołem, w pracy [114], przeprowadzili wariacyjny rachunek energii wiązania kompleksu  $(D^+, X)$  dla szerokiego zakresu wartości grubości studni kwantowej i pozycji domieszki w studni, włączając do rachunków mieszanie  $\Gamma$ - $X$  w studniach GaAs/AlAs. Stébé ze współpracownikami [115] natomiast, zbadali metodami wariacyjnymi wpływ pola magnetycznego na energię wiązania  $(D^+, X)$  w studniach GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

W tym rozdziale przeanalizujemy teoretycznie, w ramach przybliżenia masy efektywnej i przybliżenia Hartree, możliwość wiązania ekscytonu przez zjonizowany donor oddalony od dwuwymiarowej studni kwantowej. Zbadamy wpływ zmieniającej się odległości pomiędzy płaszczyzną studni kwantowej, a zjonizowanym donorem  $D^+$ , wpływ zewnętrznego, jednorodnego pola magnetycznego skierowanego prostopadle do płaszczyzny studni, a także stosunku stałych dielektrycznych materiału studni i otaczającego ją półprzewodnika na energię stanu podstawowego ekscytonu związanego przez zjonizowany donor. Przeanalizujemy również zależność energii wiązania od stosunku mas efektywnych elektronu i dziury.

### 8.3 Model i metoda

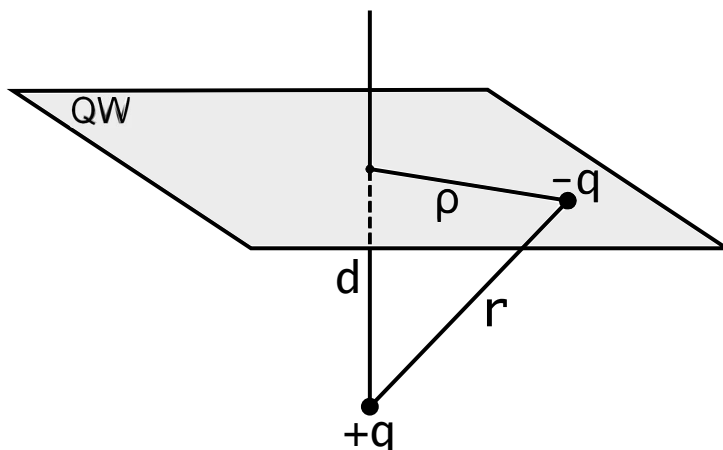
W naszym modelu zakładamy, że zjonizowany donor znajduje się w odległości  $d$  od kwazidwuwymiarowej studni kwantowej, w której poruszają się elektron i dziura.

W płaszczyźnie studni potencjał pochodzący od zjonizowanego donora, oddalonego na odległość  $d$  od studni, będzie miał postać (rysunek 8.1)

$$\vartheta_i(\rho_i) = \frac{q}{4\pi\epsilon_1\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}|}$$

lub

$$\vartheta_i(\rho_i) = \frac{q}{4\pi\epsilon_1\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\rho_i^2 + d^2}}, \quad (8.1)$$



Rysunek 8.1: Zjonizowany donator (o ładunku  $+q$ ) oddalony od studni kwantowej (QW) na odległość  $d$ . W płaszczyźnie studni pokazany został tylko elektron obdarzony ładunkiem  $-q$ .

a wzór na energię potencjalną nośników ładunku przyjmie postać

$$V_i(\rho_i) = \mp \frac{q^2}{4\pi\epsilon_1\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{\rho_i^2 + d^2}}, \quad (8.2)$$

gdzie znak minus odpowiada elektronowi ( $i = e$ ), a plus dziurze ( $i = h$ ),  $\rho_e$  i  $\rho_h$  są promieniami, odpowiednio elektronu i dziury w płaszczyźnie studni, a  $\epsilon_1$  jest stałą dielektryczną materiału otaczającego studnię (materiału bariery).

Zakładamy, że studnia kwantowa, w której poruszają się elektron i dziura charakteryzuje się nieskończonymi barierami potencjału.<sup>1</sup> W praktyce bariera między półprzewodnikami studni musi być dużo wyższa, niż maksymalna wartość potencjału pochodząca od donora — donor nie może znajdować się za blisko studni (dla  $\epsilon_1 = 12,4$  energia ładunku elementarnego  $q$  w potencjale donora oddalonego o  $d = 1$  nm wynosi 122 meV, a więc bariera na styku półprzewodników musi być znacząco większa od tej wartości).

Pole magnetyczne, jeśli jest obecne, przyłożone jest prostopadle do płaszczyzny studni, tak, że układ zachowuje symetrię cylindryczną. Nasz model, tak jak w przypadku kropek kwantowych, ograniczymy tylko do współrzędnych przestrzennych — spinowe stopnie swobody i związane z nimi rozszczepienie Zeemana (liniowe w stosunku do pola  $B$ ) nie zostały uwzględnione w naszym opisie (dla GaAs, materiału studni która posłuży nam za przykład, rozszczepienie to jest bardzo małe  $\sim 0,03$  meV/T).

<sup>1</sup>W bardziej realistycznym przypadku (skończone bariery potencjału) należałoby wziąć po uwagę możliwość tunelowania elektronu ze studni do zjonizowanego donora.

Pomimo faktu, że potencjał (8.1) zjonizowanego donora jest przyciągający tylko dla elektronu (analogia z kropkami kwantowymi drugiego rodzaju), jest w zasadzie możliwe związanie przez ten potencjał pary elektron-dziura (ekscytonu) dzięki oddziaływaniu kulombowskiemu pomiędzy tymi dwiema cząstkami.

Aby znaleźć w przybliżeniu Hartree energię ekscytonu zwiazanego przez zjonizowany donor zakładamy jego funkcję falową w postaci iloczynu (3.2) i, mając na uwadze fakt, że energia potencjalna posiada symetrię kołową, możemy zastosować do wyznaczenia energii metody rozwinięte w rozdziałach 6 i 4. Mianowicie jednocząstkowe energie Hartree i funkcje falowe są wyznaczone w przybliżeniu masy efektywnej przez rozwiązywanie samouzgodnionych różniczkowo-całkowych równań Hartree (6.10) i (6.11) z potencjałami Hartree (3.7) i (3.8), w których z kolei  $V_e$  i  $V_h$  dane są wzorem (8.2) (dla elektronu z minusem, dla dziury z plusem). Do numerycznego rozwiązywania tego układu równań używamy algorytmu opisanego w rozdziale 4.

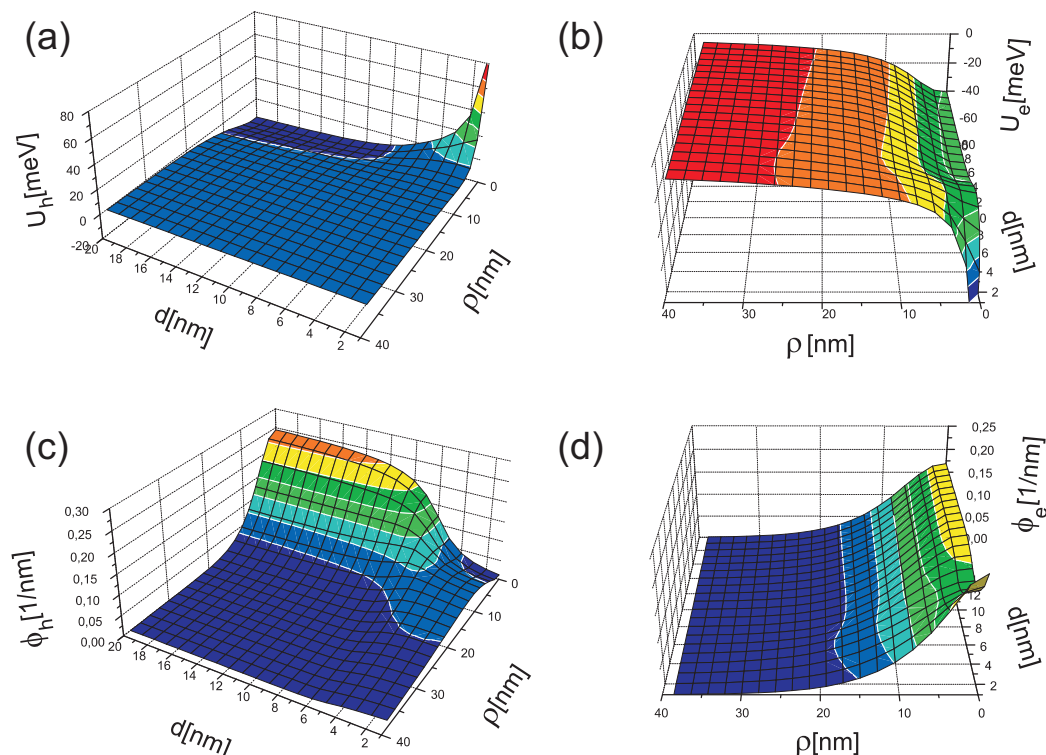
Po rozwiązaniu równań Hartree energię ekscytonu otrzymujemy ze wzoru (3.9), w którym energia oddziaływania kulombowskiego  $V_C$  dana jest wyrażeniem (3.10).

Ponieważ we wzorze (8.2)  $\epsilon_1$  oznacza stałą dielektryczną materiału bariery w całkach Hartree użyjemy oznaczenia  $\epsilon_2$  na stałą dielektryczną materiału studni. Jeśli nie zaznaczono inaczej, parametry użyte w obliczeniach odpowiadają studni GaAs tj.  $\epsilon_2 = 12,4$ ,  $m_e/m_0 = 0,0665$  i  $m_h/m_0 = 0,3774$ , co daje  $\sigma = 0.176$ .

## 8.4 Rezultaty i dyskusja

Wyniki obliczeń Hartree dla wymienionych powyżej stałych materiałowych oraz dla stałej dielektrycznej bariery równej co do wartości stałej dielektrycznej studni  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12,4$ , przedstawione zostały na rysunkach 8.2 i 8.3(a).

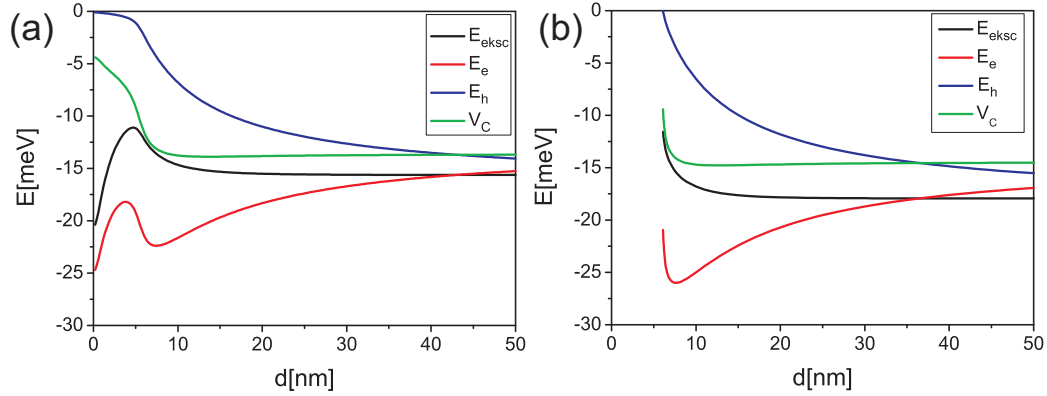
Pierwszy z nich ilustruje potencjały Hartree i funkcje falowe elektronu i dziury, w zależności od odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni kwantowej (odległość  $d$  zmienia się od 1 nm do 20 nm). Jak widać dla małych odległości  $d$  potencjał Hartree dziury jest silnie odpychający i dziura znajduje się z dala od środka układu — w pierścieniu dookoła osi symetrii. W miarę jak odległość  $d$  rośnie odpychanie staje się coraz słabsze i dla  $d$  wynoszącego około 6 nm dziura „przelewa się” do centrum układu. Potencjał Hartree elektronu jest cały czas przyciągający, ale jego minimum głębokie dla małych  $d$  ze względu na bliskość donora, staje się stosunkowo płytkie, kiedy odległość  $d$  wynosi około 3 nm. Dla odległości  $d > 10$  nm potencjały Hartree, a co za tym idzie



Rysunek 8.2: Potencjały Hartree dziury (a) i elektronu (b) i ich funkcje falowe (c) i (d) w zależności od odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni kwantowej, w której znajdują się nośniki. Parametry użyte w obliczeniach to  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12,4$  oraz  $\sigma = 0,176$ .

także funkcje falowe obu nośników, prawie przestają się zmieniać, co świadczy o malejącym wpływie donora na stan podstawowy ekscytonu.

Rysunek 8.3 przedstawia energie dziury, elektronu, ekscytonu, a także energie oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronem a dziurą, jako funkcję odległości donora od płaszczyzny studni. Energia dziury dla małych  $d$  początkowo maleje bardzo wolno, by po przekroczeniu granicy  $d \sim 5$  nm, po której dziura przechodzi z pierścienia do centrum układu, zacząć maleć szybciej. Energia elektronu natomiast szybko rośnie wraz z oddalaniem donora od płaszczyzny studni, aż do około  $d = 4$  nm, po czym zaczyna maleć. Spadek ten jest spowodowany przemieszczaniem się dziury z pierścienia do centrum układu — na skutek tego przemieszczenia oddziaływanie kulombowskie, rośnie, a co za tym idzie energia elektronu staje się bardziej ujemna. Dla  $d \sim 8$  nm energia ta znowu zaczyna rosnąć. Wzrost ten, dla  $d > 20$  nm, jest równoważony jest przez spadek energii dziury, a ponieważ dla takich odległości donora od płaszczyzny studni energia oddziaływania kulombowskiego

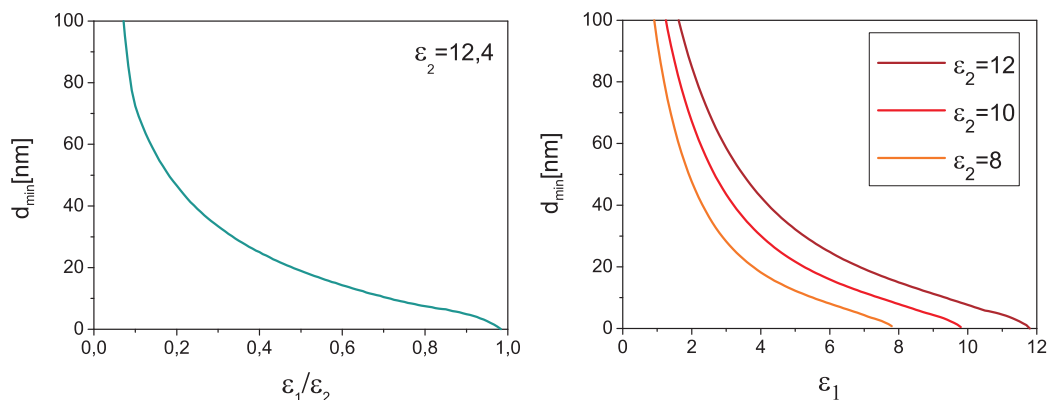


Rysunek 8.3: Energie Hartree elektronu (czerwony) i dziury (niebieski), energia ekscytonu (czarny) oraz energia oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronem i dziurą (zielony), w zależności od odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni kwantowej, dla parametrów  $\sigma = 0,176$  oraz (a)  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12,4$ , (b)  $\epsilon_1 = 10,1$  i  $\epsilon_2 = 12,4$ .

jest już praktycznie stała, energia ekscytonu nie zmienia się i powinna odpowiadać energii swobodnego dwuwymiarowego ekscytonu. W tym miejscu należy zwrócić uwagę na fakt, że (o czym była już mowa w podrozdziale 3.3) w układzie oddziaływujących cząstek nie jest możliwe jednoznaczne określenie energii jednocząstkowych. Energia całego układu (ekscytonu) stanowi jedyny bezpośredni kontakt z eksperymentem zatem dalsza zmiana energii jednocząstkowych (dla  $d > 20$  nm) może być nieistotna z fizycznego punktu widzenia.

Rysunek 8.3(b) również przedstawia energie Hartree elektronu i dziury, energię ekscytonu oraz energię oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronem i dziurą, w zależności od odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni kwantowej, ale tym razem stała dielektryczna studni  $\epsilon_2 = 12,4$  jest większa od stałej dielektrycznej bariery — równej  $\epsilon_1 = 10,1$  — w której znajduje się donor. Najważniejszą zmianą, w stosunku do energii przedstawionych na rysunku (a), jest pojawienie się stanu związanego dziury dopiero dla  $d$  wynoszącego około 6 nm. Dla mniejszych odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni energia dziury  $\varepsilon_h$  jest dodatnia. Dalszy przebieg energii jest podobny do tego z wykresu (a).

Z porównania rysunków 8.3(a) i 8.3(b) wywnioskować można, że dla stałej dielektrycznej bariery mniejszej od stałej dielektrycznej studni  $\epsilon_1 < \epsilon_2$  istnieje minimalna odległość  $d_{\text{min}}$  na jaką trzeba odsunąć donor od płaszczyzny studni kwantowej żeby pojawił się stan związany dziury, a co za tym idzie zjonizowany donor związał parę elektron-dziura. Zależność tej odległo-



Rysunek 8.4: (a) Zależność minimalnej odległości  $d_{min}$ , na jaką odsunąć trzeba donor od płaszczyzny studni, żeby pojawił się stan związany dziury, od stosunku przenikalności dielektrycznych  $\epsilon_1/\epsilon_2$  przy ustalonym  $\epsilon_2 = 12,4$ . (b) Zależność tej samej odległości od  $\epsilon_1$  dla trzech różnych wartości  $\epsilon_2$ .

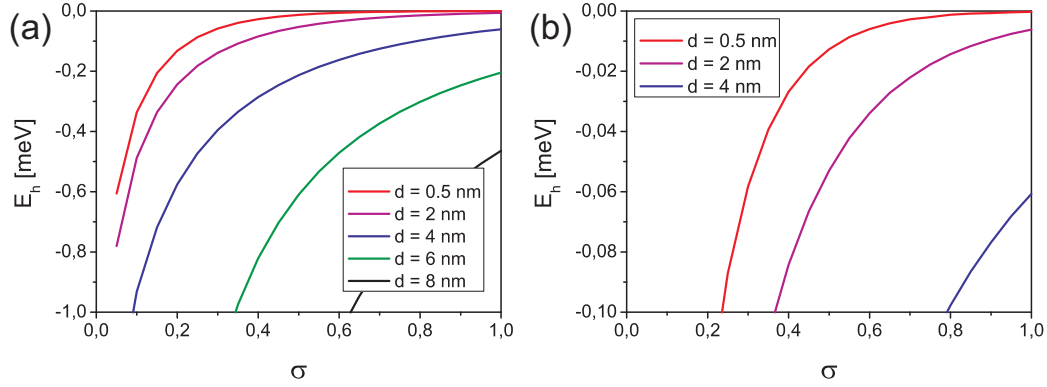
ści od stosunku  $\epsilon_1/\epsilon_2$ , przy ustalonym  $\epsilon_2 = 12,4$ , przedstawiona została na rysunku 8.4(a). Rysunek 8.4(b) przedstawia natomiast zależność odległości  $d_{min}$  od stałej dielektrycznej bariery  $\epsilon_1$  dla trzech różnych wartości stałej dielektrycznej studni  $\epsilon_2$ .

Jak można zauważyć na rysunku 8.4 odległość minimalna  $d_{min}$  staje się równa zero zanim stała dielektryczna bariery osiągnie wartość stałej dielektrycznej studni. Oznacza to, że dla stosunku mas  $\sigma = 0,176$ , dla którego wykonywane były obliczenia, stan związany istnieje dla  $d = 0$  i  $\epsilon_1 = \epsilon_2$ . O czym była mowa w podrozdziale 8.2, Ruan i współautorzy [110] pokazali, używając „hipersferycznego rozwinięcia adiabatycznego”, że stan związany kompleksu  $(D^+, X)$  istnieje dla donora zlokalizowanego w dwuwymiarowej studni kwantowej (wtedy  $d = 0$  i  $\epsilon_1 = \epsilon_2$ ) dla  $0 \leq \sigma \leq 1$ . Przeanalizujemy teraz możliwość wiązania przez zjonizowany donor ekscytynu dla różnych wartości stosunku mas efektywnych elektronu i dziury  $\sigma = m_e/m_h$  w ramach rachunku Hartree. Ponieważ jednak w naszych obliczeniach nie możemy położyć  $d = 0$  zbadamy jak zmienia się energia dziury wraz ze zmianą  $d$ , dla wszystkich stosunków mas, szczególnie w przypadku kiedy odległość ta jest bardzo mała<sup>2</sup>.

Rysunek 8.5 ilustruje zależność energii dziury od stosunku mas efektywnych  $\sigma$  dla kilku różnych odległości donora od płaszczyzny studni kwantowej ( $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12$ ,  $m_e = 0,0665 m_0$ ). Dla wszystkich rozpatrywanych odległości  $d$  energia ta jest ujemna i rośnie wraz ze stosunkiem mas  $\sigma$  nie osiągając ze-

<sup>2</sup> Dla bardzo małych odległości  $d$  w naszych obliczeniach na siatce krok  $s$  musi być znacznie mniejszy od tej odległości.



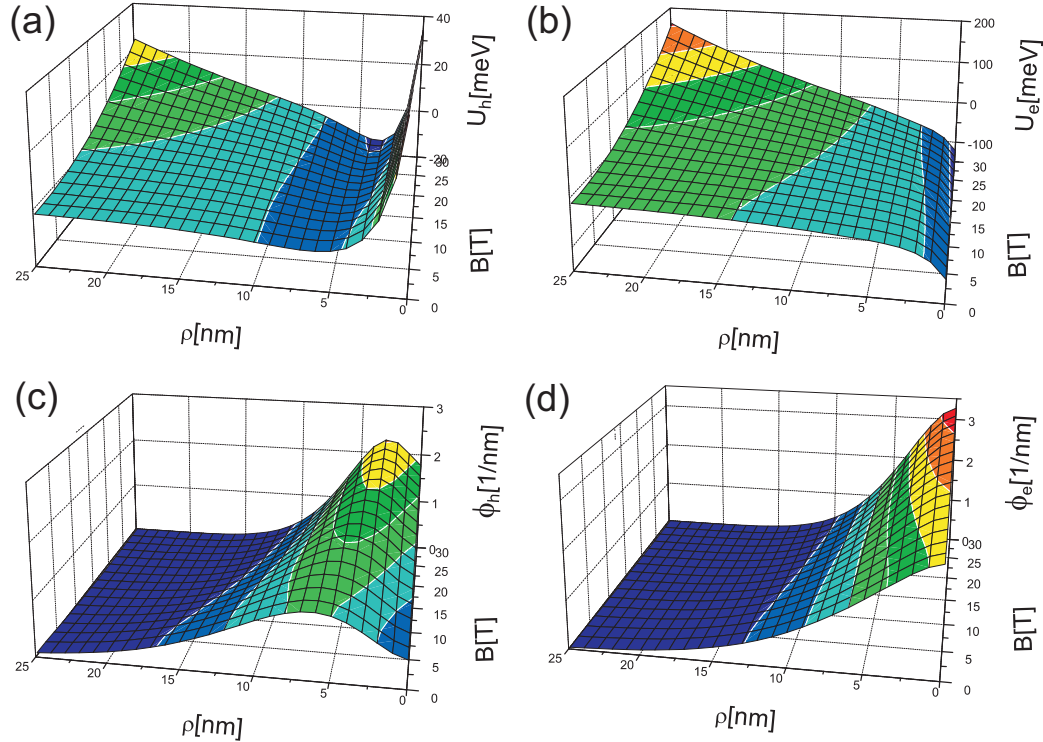


Rysunek 8.5: (a) Zależność energii dziury od stosunku mas efektywnych elektronu i dziury dla kilku różnych odległości donora od płaszczyzny studni kwantowej ( $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12$ ,  $m_e = 0,0665m_0$ ). (b) Ta sama zależność dla pomniejszonego zakresu energii.

ra. Ponadto im większa odległość  $d$  tym mniejsza (bardziej ujemna) energia dziury, co pozostaje w zgodzie z wynikami przedstawionymi na rysunku 8.3 dla szczególnej wartości stosunku mas  $\sigma = 0,176$ . Co więcej, dla stosunku mas  $\sigma = 1$  (przy  $\epsilon_1 = \epsilon_2$ ) za pomocą naszych rachunków możemy pokazać, że stan związany dziury ( $\epsilon_h < 0$ ), a co za tym idzie również ekscytonu, istnieje nawet dla bardzo małych  $d$ .<sup>3</sup>

Po włączeniu pola magnetycznego skierowanego prostopadle do płaszczyzny studni kwantowej, w której poruszają się nośniki, funkcje falowe zarówno dziury jak i elektronu ulegają ściśnięciu, za co odpowiedzialny jest człon Landauowski we wzorach (6.10) i (6.11). Funkcje te, dla stanu podstawowego ekscytonu ( $n_e = n_h = 1$  i  $l_e = l_h = 0$ ), a także efektywne potencjały Hartree elektronu i dziury w zależności od pola magnetycznego, dla ustalonej odległości donora od płaszczyzny studni, wynoszącej  $d = 1$  nm, zilustrowane zostały na rysunku 8.6. Jak widać, z części (c) tego rysunku, nawet dla dużych wartości pola magnetycznego maksimum funkcji falowej dziury pozostaje oddalone od początku układu współrzędnych, — dziura nie przeskakuje do centrum, tak jak w przypadku kropki kwantowej drugiego rodzaju (zarówno Gaussowskiej jak i prostokątnej). Dzieje się tak ponieważ potencjał donora oddalonego na niewielką odległość (tutaj  $d = 1$  nm) jest zbyt wysoki dla małych  $\rho$  aby przyciąganie kulombowskie elektronu mogło stanowić dla niego przeciwwagę. Kiedy natomiast donor jest oddalony na odległość  $d > 4$  nm (rysunek 8.2c) drugie minimum dwudolinowego potencjału przestaje istnieć

<sup>3</sup>Dla bardzo małych  $d$  funkcja falowa dziury staje się coraz bardziej rozpostarta przestrzennie — ogranicza nas więc tutaj złożoność obliczeń numerycznych.



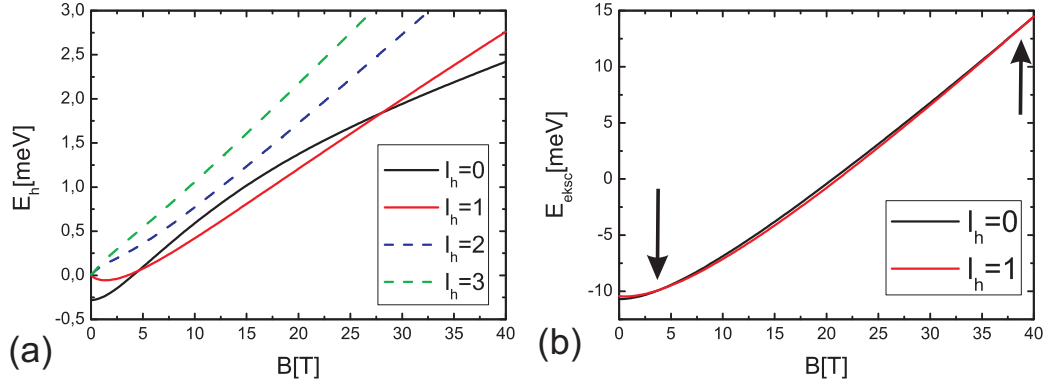
Rysunek 8.6: Efektywne potencjały Hartree dziury (a) i elektronu (b) i ich funkcje falowe (c) i (d) w zależności od wartości pola magnetycznego  $B$  skierowanego prostopadle do płaszczyzny studni kwantowej. Odległość donora od studni w której znajdują się nośniki wynosi  $d = 1$  nm, a parametry użyte w obliczeniach to  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12$  oraz  $\sigma = 0,176$ .

i omawiany układ przypomina prostą kropkę pierwszego rodzaju. Stąd tylko dla niewielkich odległości donora od płaszczyzny studni kwantowej udaje się utrzymać naszą analogię z kropkami kwantowymi drugiego rodzaju.

W takim przypadku interesującą wydaje się być kwestia, czy dla odpowiednich odległości donora od płaszczyzny studni kwantowej dostaniemy w wyniku, podobnie jak w kropkach gaussowskich drugiego rodzaju, oscylacje Aharonova-Bohma, czy też kształt potencjału pochodzącego od donora je uniemożliwi.

Ponieważ dla  $d > 4$  nm ( $\epsilon_1 = 12, 4$ ) maksimum funkcji dziury znajduje się w centrum układu, to oscylacji możemy poszukiwać jedynie dla  $d < 4$  nm.

Rysunek 8.7 przedstawia zależność dwóch najniższych energii Hartree dziury (a) oraz energii ekscytynu (b) od pola magnetycznego dla odległości donora od płaszczyzny studni  $d = 2,6$  nm. Kolorem czarnym oznaczono stan z  $l_h = 0$ , natomiast czerwonym stan z  $l_h = 1$ . Oba te stany są stanami



Rysunek 8.7: Zależność dwóch najniższych energii Hartree dziury (a) oraz energii ekscytonu (b) od pola magnetycznego dla odległości donora od płaszczyzny studni  $d = 2,6$  nm. Kolorem czarnym oznaczono stan z  $l_h = 0$ , natomiast czerwonym stan z  $l_h = 1$  (dla obu z nich  $n_e = n_h = 1$ ,  $l_e = 0$ ). Oba te stany są stanami związanymi dla  $B = 0$ . Rysunek (a) przedstawia dodatkowo (liniami przerywanymi) energie Hartree dla  $l_h = 2$  oraz  $l_h = 3$  — stany te bez pola magnetycznego nie są stanami związanymi. (Na rysunkach nie uwzględniono stanów z  $l_h < 0$ .) Parametry użyte w obliczeniach to  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = 12,4$  oraz  $\sigma = 0,176$ .

związanymi dla  $B = 0$ . Stan podstawowy ekscytonu zmienia swój moment pędu dla  $B \approx 4$  T. Jak pokazaliśmy w podrozdziale 6.6 wiąże się to z wygaszaniem w widmie fotoluminescencji (prawdopodobieństwo rekombinacji ekscytonu drastycznie maleje). Dla większych wartości pola magnetycznego  $\sim 39$  T stan z  $l_h = 0$  na powrót staje się stanem podstawowym. Stany z  $l_h > 1$  nie są związane bez pola magnetycznego ponieważ dla tych stanów  $\epsilon_h > 0$  (zależność energii Hartree dziury od pola magnetycznego dla dwóch spośród nich przedstawiona jest na rysunku 8.7a liniami przerywanymi). Ponadto energie tych stanów nie przecinają się z energiami stanów z niższymi momentami pędu dziury.

Dla większych wartości odległości donora od studni ( $d > 3$  nm) linie przedstawiające zależności od pola magnetycznego dwóch najniższych stanów energii (z  $l_h = 0$  i  $l_h = 1$ ) przestają się przecinać i układ zaczyna przypominać kropkę kwantową pierwszego rodzaju, coraz więcej stanów z wyższymi momentami pędu staje się związana bez pola magnetycznego, a wpływ donora na ekscyton w studni maleje.

## 8.5 Podsumowanie

W rozdziale tym rozważaliśmy możliwość związania ekscytonu przez zjonizowany donor oddalony od płaszczyzny studni kwantowej, w której znajdują się nośniki ładunku. Jak się okazało, dla równych stałych dielektrycznych materiału bariery i studni zjonizowany donor jest w stanie związać ekscyton dla dowolnego stosunku mas ( $0 < \sigma < 1$ ) nawet dla bardzo małych odległości donora od płaszczyzny studni (ograniczeniem była tu tylko złożoność obliczeń numerycznych), co więcej, dla stałej dielektrycznej materiału bariery mniejszej od stałej dielektrycznej materiału studni, warunkiem niezbędnym aby ekscyton mógł zostać związany przez zjonizowany donor jest przesunięcie tego ostatniego na pewną minimalną odległość. Zależność tej krytycznej odległości od stałej dielektrycznej bariery została przez nas wyznaczona dla kilku różnych wartości stałej dielektrycznej studni. Ponadto dla różnych odległości donora od płaszczyzny studni dla których stan związany ekscytonu istniał wyliczyliśmy energię związanego ekscytonu.

Ze względu na podobieństwo potencjału oddalonego od studni kwantowej donora do potencjału kropki kwantowej drugiego rodzaju (w szczególności kropki zadawanej polem elektrycznym) spodziewaliśmy się, że dla pewnych wartości odległości donora od płaszczyzny studni, analogicznie jak w przypadku kropek kwantowych drugiego rodzaju, będziemy mieli do czynienia z oscylacjami Aharonova-Bohma w widmie fotoluminescencji. Jednakże kształt potencjału pochodzącego od donora powoduje, że nawet dla małych odległości  $d$  donora od płaszczyzny studni, dla których jeden z nośników ładunku (dziura) znajduje się w pierścieniu dookoła osi symetrii układu, oscylacje te bądź nie występują, bądź mamy do czynienia tylko z niewielką liczbą przeskoków momentu pędu stanu podstawowego układu.

# Podsumowanie

Przedmiotem rozprawy była dyskusja nad własnościami optycznymi kropek kwantowych drugiego rodzaju czyli kropek, które przyciągają tylko jeden rodzaj nośników ładunku, stanowiąc barierę dla drugiego. Pomimo tego, jak to zostało zaprezentowane w ramach formalizmu masy efektywnej, kropka taka może związać ekscyton, czyli parę elektron-dziura.

Do wyznaczenia stanów ekscytonu posłużyło nam znane z fizyki atomowej przybliżenie Hartree. Jego zastosowanie do opisu kropek kwantowych jest konsekwencją ich podobieństwa do naturalnych atomów.

Do rozwiązywania układu równań Hartree dla ekscytonu, związanego przez kołowo symetryczny potencjał dwuwymiarowej kropki kwantowej, posłużył nam schemat obliczeniowy opracowany w rozdziale 4. Pozwolił on wyznaczyć stany tej cząstki w gaussowskich i prostokątnych kropkach kwantowych drugiego rodzaju, których opis w zależności od parametrów kontrolujących rozmiar tych struktur podany został w rozdziale 5. Jak zostało w nim pokazane bardzo charakterystyczną cechą kropek drugiego rodzaju, jest zależność energii wiązania ekscytonu, a co za tym idzie również energii fotoluminescencji od rozmiarów kropki. Dla dużych kropek energia wiązania stanu podstawowego ekscytonu (a także, w mniejszym stopniu, energie wyższych stanów) maleje wraz z malejącym rozmiarem kropki, żeby po przekroczeniu pewnego krytycznego rozmiaru kropki gwałtownie wzrosnąć. Dzieje się tak ponieważ dla odpowiednio małych kropek bariera jaką tworzy kropka dla jednego rodzaju nośnika ładunku (w naszym przypadku była to dziura) staje się na tyle mała, że może on przejść do środka kropki. Pociąga to za sobą gwałtowny wzrost energii oddziaływania kulombowskiego, a co za tym idzie wzrost energii wiązania ekscytonu. Konsekwencją tego powinien być gwałtowny spadek energii fotoluminescencji (równej sumie energii ekscytonu i energii przerwy wzbronionej).

Z przejściem dziury do centrum kropki wiąże się również gwałtowny wzrost prawdopodobieństwa rekombinacji ekscytonu. Prawdopodobieństwo to dla odpowiednio dużych kropek jest bardzo niewielkie, natomiast dla kropek o niewielkich rozmiarach jest zbliżone do analogicznego prawdopodobieństwa

dla kropek pierwszego rodzaju, gdzie funkcje falowe elektronu i dziury przekrywają się w znacznym stopniu. Dlatego też można się spodziewać niewielkiego natężenia pików fotoluminescencji dużych kropek kwantowych drugiego rodzaju (niezależnie od ich kształtu), co czyni je trudniejszym obiektem obserwacji niż kropki pierwszego rodzaju.

Podsumowując, ewolucja pików w widmie fotoluminescencji związanego z rekombinacją ekscytonu ze stanu podstawowego, wraz z rozmiarem kropki kwantowej (drugiego rodzaju) powinna przebiegać następująco. Pik ten wraz ze zmniejszaniem się kropki powinien przesuwać się w stronę wyższych energii, po czym, po przekroczeniu krytycznego rozmiaru kropki, powinien przesunąć się w stronę niższych energii (przy jednoczesnym wzroście natężenia), a potem kontynuować trend wzrostowy przed skoku.

Rozdział 5 zawiera również dyskusję i opis wyższych stanów wzbudzonych w kropkach drugiego rodzaju. Ich wpływ na widmo fotoluminescencji jest podyktowany przez reguły wyboru, z których wynika, że dla struktur o symetrii cylindrycznej promienista rekombinacja ekscytonu jest możliwa tylko dla stanów z  $L = l_e + l_h = 0$ . Dodatkowo ze względu na fakt, że w takich strukturach wewnątrzpasemowe przejścia dipolowe są zablokowane dla stanów o zerowym momencie pędu cząstki (dla elektronu są to przejścia pomiędzy stanami z  $l_e = 0$  i różnymi  $n_h$ , a dla dziury — pomiędzy stanami z  $l_h = 0$  i różnymi  $n_h$ ) w widmie fotoluminescencji mogą pojawić się piki związane z rekombinacją ekscytonu ze stanów o wyższych wartościach liczb  $n_e$  i  $n_h$  przy ustalonych liczbach  $l_e = 0$  i  $l_h = 0$ .

Opisana struktura widma jest konsekwencją symetrii cylindrycznej — w przypadku jej braku element dipolowy przejścia wewnątrzpasemowego nie znika i cząstki znajdujące się w stanach z  $n_e > 1$  i  $n_h > 1$  mogą przechodzić do stanów o niższych wartościach tych liczb kwantowych. W takim przypadku również przejścia międzypasmowe nie muszą spełniać reguły wyboru  $L = 0$  i co za tym idzie rekombinacja promienista ekscytonu ze stanów o wyższych momentach pędu (elektronu bądź dziury) może decydować o kształcie widma fotoluminescencji kropki.

Charakterystyczna zależność energii wyższych stanów od rozmiaru kropki kwantowej, zarówno tych z  $l_e = l_h = 0$ , jak i stanów z wyższymi momentami pędu, opisana w rozdziale 5 może pozwolić na rozróżnienie z którymi z tych dwóch rodzajów przejść mamy do czynienia, a co za tym idzie, rozstrzygnięcie, czy badana kropka posiada symetrię cylindryczną.

W rozdziale 6 omówiliśmy wpływ na widmo fotoluminescencji kropek kwantowych drugiego rodzaju prostopadłego do płaszczyzny kropki, pola magnetycznego. Pokazaliśmy, że rachunki Hartree prowadzą do przeskoków momentu pędu stanu podstawowego ekscytonu i związanych z nimi oscylacji Aharonova-Bohma. Nasze wyniki dla kropek prostokątnych porównaliśmy z

wynikami doświadczalnymi dla kropek z InP/GaAs, przy czym na drodze teoretycznej otrzymaliśmy nieco większy rozmiar promienia kropek od zmierzonego doświadczalnie, czego przyczyn dopatrujemy się w niedokładnych danych związanych z przesunięciami energetycznymi w strukturze InP/GaAs, bądź też w przyjętym kształcie kropki.

Dodatkowo dla dwóch rodzajów kropek (gaussowskiej i prostokątnej) o określonych rozmiarach wyznaczyliśmy krytyczną wartość pola magnetycznego, przy której nośnik, który pod nieobecność pola znajduje się w pierścieniu dookoła kropki, przechodzi do centrum kropki. Jak pokazaliśmy, z przejściem tym, (tak jak w przypadku ewolucji widma z rozmiarem) powinien wiązać się duży wzrost natężenia w widmie fotoluminescencji.

Rozdział 7 zawiera analizę wpływu bocznego pola elektrycznego na ekscyton związany przez kropkę kwantową drugiego rodzaju. Energie i funkcje falowe ekscytonu wyliczamy w tym przypadku przy użyciu metod wariacyjnych (z uwagi na fakt, że boczne pole elektryczne łamie symetrię osiową układu). Wyznaczamy kolejno zależności energii Hartree elektronu, energii Hartree dziury oraz energii oddziaływania kulombowskiego i energii ekscytonu od wartości przyłożonego pola. Nasze wyliczenia, ograniczone do przypadku dużych kropek kwantowych, dają w wyniku energię ekscytonu, która okazuje się zależęć niemalże liniowo od wartości przyłożonego bocznego pola. Oprócz energii ekscytonu i związanych z nią własności optycznych dyskutowane są również tunelowanie dziury z kropki, a także moment dipolowy ekscytonu indukowany przyłożonym polem.

Jak to zostało pokazane w dwóch omówionych powyżej rozdziałach duże kropki kwantowe drugiego rodzaju są szczególnie podatne na sterowanie polami o niewielkich wartościach, co czyni je obiecującym obiektem badań i potencjalnym przedmiotem przyszłych praktycznych zastosowań związanych z nanotechnologią i optoelektroniką.

Ostatni rozdział niniejszej rozprawy poświęcony jest ekscytonowi związanemu w studni kwantowej przez zjonizowany donor oddalony od jej płaszczyzny. Potencjał zjonizowanego donora oddalonego od studni kwantowej jest bardzo podobny do potencjału kropki kwantowej drugiego rodzaju zadananej polem elektrycznym — jest przyciągający dla nośników ładunku tylko jednego rodzaju, a ponadto jest pozbawiony osobliwości. Z tego względu spodziewaliśmy się również podobieństw w widmie fotoluminescencji obu układów.

Ponieważ jednak nie dla wszystkich wartości odległości donora od płaszczyzny studni, stosunku stałych dielektrycznych materiału studni i bariery, oraz stosunku mas elektronu i dziury oddalony donor może związać ekscyton w studni — z tego względu zbadaliśmy najpierw dla jakich wartości tych parametrów będzie istniał stan związany. Jak się okazało, dla równych stałych

dielektrycznych materiału bariery i studni zjonizowany donor jest w stanie związać ekscyton dla dowolnego stosunku mas ( $0 < \sigma < 1$ ) nawet dla bardzo małych odległości donora od płaszczyzny studni (ograniczeniem była tu tylko złożoność obliczeń numerycznych), co więcej, dla stałej dielektrycznej materiału bariery mniejszej od stałej dielektrycznej materiału studni, warunkiem niezbędnym aby ekscyton mógł zostać związany przez zjonizowany donor jest przesunięcie tego ostatniego na pewną minimalną odległość. Zależność tej krytycznej odległości od stałej dielektrycznej bariery została przez nas wyznaczona dla kilku różnych wartości stałej dielektrycznej studni. Ponadto dla różnych odległości donora od płaszczyzny studni dla których stan związany ekscytonu istniał wyliczyliśmy energię związanego ekscytonu.

Ze względu na wspomniane wcześniej podobieństwo potencjału oddalonego od studni kwantowej donora do potencjału kropki kwantowej drugiego rodzaju spodziewaliśmy się, że dla pewnych wartości odległości donora od płaszczyzny studni, analogicznie jak w przypadku kropek kwantowych drugiego rodzaju, będziemy mieli do czynienia z oscylacjami Aharonova-Bohma w widmie fotoluminescencji. Jednakże charakterystyczny kształt potencjału pochodzącego od zjonizowanego donora powoduje, że nawet dla niewielkich odległości donora od studni mamy do czynienia tylko z niewielką liczbą przeskoków momentu pędu stanu podstawowego układu.



# Dodatek A

## Całka Hartree

Jeśli  $|\phi(\mathbf{r})|$  posiada symetrię osiową, wprowadzamy oznaczenie

$$f(\rho) \equiv |\phi(\mathbf{r})|^2$$

i całkę Hartree możemy zapisać w następujący sposób

$$\int \frac{f(\rho)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} = \int_0^\infty \left[ \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos \varphi}} d\varphi \right] f(\rho) \rho d\rho.$$

W całce po kącie znak minus pod pierwiastkiem zamieniamy na plus i zmieniamy granice całkowania

$$2 \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + \rho'^2 + 2\rho\rho' \cos \varphi}} d\varphi.$$

Jeśli teraz użyjemy związku  $\cos \varphi = 1 - \sin^2(\varphi/2)$  otrzymamy

$$\frac{2}{\rho + \rho'} \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}} d\varphi.$$

lub po zamianie  $\vartheta = \varphi/2$

$$\frac{4}{\rho + \rho'} \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2} \sin^2 \vartheta}} d\vartheta.$$

Całka postaci

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - m \sin^2 \vartheta}} d\vartheta, \quad (0 < m < 1)$$

nazywa się zupełną całką eliptyczną pierwszego rodzaju w postaci Legendre'a [76]. Korzystając z tego przedstawienia możemy zapisać całkę Hartree w postaci

$$\int \frac{f(\rho)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} = \int_0^\infty \frac{4\rho f(\rho)}{\rho + \rho'} K\left(\frac{4\rho\rho'}{(\rho + \rho')^2}\right) d\rho.$$



## Dodatek B

# Wyznaczanie parametrów wariacyjnych

### B.1 Energia elektronu

Wyrażenie na energię elektronu otrzymamy wstawiając hamiltonian (7.10) do (7.9)

$$\begin{aligned}\varepsilon_e &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \int \psi_e^* \nabla^2 \psi_e \, d\mathbf{r} - V_0 \int |\psi_e|^2 e^{-\rho^2/L^2} \, d\mathbf{r} + q \int |\psi_e|^2 \mathbf{E} \cdot \mathbf{r} \, d\mathbf{r} \\ &= A_1 + A_2 + A_3,\end{aligned}\quad (\text{B.1})$$

i podstawiając za  $\psi_e$  funkcję falową daną przez (7.7).

Wyliczymy teraz poszczególne składniki powyższego wzoru. Pierwszy z nich wynosi

$$\begin{aligned}A_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} A_e^2 \int e^{-(\beta_e/2)(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) e^{-(\beta_e/2)(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} \, d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} A_e^2 \int e^{-\beta_e(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} \left( -\beta_e/\lambda_0^2 \right) \left[ 2 + \left( -\beta_e/\lambda_0^2 \right) (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)^2 \right] \, d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} A_e^2 \left( -\beta_e/\lambda_0^2 \right) \left[ 4\pi \left( \lambda_0^2/2\beta_e \right) + \left( -\beta_e/\lambda_0^2 \right) 2\pi \left( \lambda_0^4/2\beta_e^2 \right) \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m_e} A_e^2 \pi,\end{aligned}$$

drugi natomiast jest równy

$$\begin{aligned}
 A_2 &= -V_0 A_e^2 \int e^{-\beta_e(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} e^{-\rho^2/L^2} d\mathbf{r} \\
 &= -V_0 A_e^2 e^{-\beta_e \rho_0^2/\lambda_0^2} \int_0^\infty e^{-\beta_e \rho^2/\lambda_0^2} e^{-\rho^2/L^2} \left[ \int_0^{2\pi} e^{(-2\beta_e \rho_0 \rho/\lambda_0^2) \cos \varphi} d\varphi \right] d\rho \\
 &= -2\pi V_0 A_e^2 e^{-\beta_e \rho_0^2/\lambda_0^2} \int_0^\infty e^{-(\beta_e/\lambda_0^2 + 1/L^2)\rho^2} I_0(2\beta_e \rho_0 \rho/\lambda_0^2) d\rho \\
 &= -2\pi V_0 A_e^2 e^{-\beta_e \rho_0^2/\lambda_0^2} \left( \beta_e/\lambda_0^2 + 1/L^2 \right)^{-1} \exp \left[ \left( \beta_e/\lambda_0^2 \right)^2 \left( \beta_e/\lambda_0^2 + 1/L^2 \right)^{-1} \rho_0^2 \right].
 \end{aligned}$$

W celu obliczenia trzeciego członu, członu  $A_3$ , korzystając z (7.6), rozpisujemy

$$q\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = \frac{V_0}{L^2} [(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)^2 - \rho^2 - \rho_0^2].$$

Wtedy

$$A_3 = \frac{V_0}{L^2} (B_1 + B_2 + B_3),$$

gdzie

$$\begin{aligned}
 B_1 &= A_e^2 \int e^{-\beta_e(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} (\mathbf{r} + \mathbf{r}_0)^2 d\mathbf{r} \\
 &= A_e^2 \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^\infty \rho'^3 e^{-\beta_e \rho'^2/\lambda_0^2} d\rho' = A_e^2 \pi \lambda_0^4 / \beta_e^2,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_2 &= -A_e^2 \int \rho^2 e^{-\beta_e(\mathbf{r}+\mathbf{r}_0)^2/\lambda_0^2} d\mathbf{r} \\
 &= -A_e^2 e^{-\beta_e \rho_0^2/\lambda_0^2} \int_0^\infty \rho^3 e^{-\beta_e \rho^2/\lambda_0^2} \left[ \int_0^{2\pi} e^{(-2\beta_e \rho_0 \rho/\lambda_0^2) \cos \varphi} d\varphi \right] d\rho \\
 &= -2\pi A_e^2 e^{-\beta_e \rho_0^2/\lambda_0^2} \int_0^\infty \rho^3 e^{-\beta_e \rho^2/\lambda_0^2} I_0(2\beta_e \rho_0 \rho/\lambda_0^2) d\rho \\
 &= -\pi A_e^2 \lambda_0^4 / \beta_e^2 \left( 1 + \beta_e \rho_0^2 / \lambda_0^2 \right)
 \end{aligned}$$

oraz, ze względu na unormowanie funkcji falowej,

$$B_3 = -\rho_0^2 \int |\psi_e|^2 d\mathbf{r} = -\rho_0^2.$$

Zbierając powyższe trzy człony razem dostajemy

$$A_3 = \frac{V_0}{L^2} \left( -\pi A_e^2 \lambda_0^2 / \beta_e - 1 \right) \rho_0^2.$$

Korzystając z (7.8), (1.3), (1.2) oraz (1.4) możemy zapisać energię elektronu w postaci

$$\frac{\varepsilon_e}{\hbar\omega_0} = \frac{\beta_e}{2} - \left( \frac{\rho_0}{\lambda_0} \right)^2 - \frac{\beta_e}{\alpha(\alpha/2 + \beta_e)} \exp \left[ -\frac{\beta_e \alpha/2}{\alpha/2 + \beta_e} \left( \frac{\rho_0}{\lambda_0} \right)^2 \right] \quad (\text{B.2})$$

Parametr  $\beta_e$  minimalizujący powyższą energię wyznaczamy z warunku

$$\frac{\partial \varepsilon_e}{\partial \beta_e} = 0. \quad (\text{B.3})$$

Prowadzi on do związku

$$1 - \left(\frac{\alpha}{2} + \beta_e\right)^{-2} \left[1 - \frac{\beta_e \alpha/2}{\alpha/2 + \beta_e} \left(\frac{\rho_0}{\lambda_0}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{\beta_e \alpha/2}{\alpha/2 + \beta_e} \left(\frac{\rho_0}{\lambda_0}\right)^2\right] = 0.$$

Dla  $\rho_0 = 0$  dostajemy  $\beta_e^{(0)} = 1 - \alpha/2$ . Dla  $\rho_0/\lambda_0 \ll 1$  rozwijamy funkcję wykładniczą w szereg

$$\exp\left[-\frac{\beta_e \alpha/2}{\alpha/2 + \beta_e} \left(\frac{\rho_0}{\lambda_0}\right)^2\right] = 1 - \frac{\beta_e \alpha/2}{\alpha/2 + \beta_e} \left(\frac{\rho_0}{\lambda_0}\right)^2 + \dots$$

i bierzemy tylko dwa pierwsze człony. Otrzymane w wyniku tego przybliżenia równanie ma cztery rozwiązania, z których tylko dwa

$$\begin{aligned} \beta_e^{(-)} &= \frac{1}{2} \left[ -(\alpha\delta - 1) - \sqrt{(\alpha\delta - 1)^2 - \alpha(\alpha - 2)} \right] \quad \text{dla } \alpha \in (0, 1), \\ \beta_e^{(+)} &= \frac{1}{2} \left[ -(\alpha\delta - 1) + \sqrt{(\alpha\delta - 1)^2 - \alpha(\alpha - 2)} \right] \quad \text{dla } \alpha \in (1, 2) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

gdzie  $\delta = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_0}{\lambda_0}\right)^2$ , spełniają warunek  $\beta_e > 0$ .

## B.2 Energia dziury

Wyrażenie opisujące energię dziury otrzymamy wstawiając funkcję falową dziury (7.12) do wzoru  $\int \psi_h^* \hat{\mathcal{H}}_h \psi_h d\mathbf{r}_h$ . W wyrażeniu tym hamiltonian ma postać

$$\hat{\mathcal{H}}_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h} \nabla^2 + \mathcal{U}_h(\mathbf{r}_h),$$

a  $\mathcal{U}_h$  dane jest przez (7.11). Otrzymujemy więc

$$\begin{aligned} \varepsilon_h &= -\frac{\hbar^2}{2m_h} \int \psi_h^* \nabla^2 \psi_h d\mathbf{r} - V_0 \int |\psi_h|^2 e^{-(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)^2/L^2} d\mathbf{r} \\ &\quad + \frac{2V_0}{L^2} \left\{ \rho_0^2 \int |\psi_h|^2 d\mathbf{r} - \int |\psi_h|^2 \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r} d\mathbf{r} \right\} \\ &\quad - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \int |\psi_h|^2 \exp\left(-\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2} \rho^2\right) I_0\left(\frac{\beta_e}{2\lambda_0^2} \rho^2\right) d\mathbf{r} \\ &= D_1 + D_2 + D_3 + D_4, \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Działamy laplasjanem we współrzędnych biegunowych

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

na funkcję (7.12) i mnożymy wynik przez tę samą funkcję, w wyniku czego człon  $D_1$  przybiera postać

$$D_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_h} A_h^2 \lambda_0 \int_0^{2\pi} e^{-\gamma \cos \varphi} \left\{ \int_0^\infty e^{-\beta_h (\rho - \rho_m)^2 / \lambda_0^2} \times \right. \\ \left[ \left( 1 + \frac{\gamma}{2} \cos \varphi + \frac{\gamma^2}{4} \sin^2 \varphi \right) \left( \frac{\rho}{\lambda_0} \right) + 3\beta_h \left( \frac{\rho_m}{\lambda_0} \right) \left( \frac{\rho}{\lambda_0} \right)^2 \right. \\ \left. \left. + \beta_h \left[ \beta_h \left( \frac{\rho_m}{\lambda_0} \right)^2 - 4 \right] \left( \frac{\rho}{\lambda_0} \right)^3 - 2\beta_h^2 \left( \frac{\rho_m}{\lambda_0} \right) \left( \frac{\rho}{\lambda_0} \right)^4 + \beta_h^2 \left( \frac{\rho}{\lambda_0} \right)^5 \right] d\rho \right\} d\varphi.$$

Całkujemy po  $\rho$  i korzystając z (7.14) otrzymujemy

$$D_1 = \frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{A_h^2 \lambda_0^2}{8\beta_h} \int_0^{2\pi} e^{-\gamma \cos \varphi} \left\{ \left[ e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} \zeta (1 + \Phi(\zeta)) \right] \times \right. \\ \left. \left[ 5 + 2\zeta^2 - 2\gamma \cos \varphi - \gamma^2 \sin^2 \varphi \right] - e^{-\zeta^2} \right\} d\varphi.$$

Po scałkowaniu po kącie dostajemy

$$D_1 = \frac{\pi \hbar^2 A_h^2 \lambda_0^2}{8m_h \beta_h} \left\{ \left[ e^{-\zeta^2} + \sqrt{\pi} \zeta (1 + \Phi(\zeta)) \right] \times \right. \\ \left. \left[ (5 + 2\zeta^2) I_0(\gamma) + \gamma I_1(\gamma) \right] - e^{-\zeta^2} I_0(\gamma) \right\}.$$

Obliczymy teraz człon  $D_2$ . Rozpisując

$$(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2 = \rho^2 + \rho_0^2 - 2\rho_0\rho \cos(\angle \mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$$

i biorąc pod uwagę fakt, że wektor pola elektrycznego jest skierowany pod kątem  $\pi$  do osi x-ów, mamy  $\cos(\angle \mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = -\cos \varphi$  i możemy napisać

$$D_2 = -V_0 A_h^2 e^{-\rho_0^2 / L^2} \times \\ \int_0^\infty \rho^3 e^{-\rho^2 / L^2} e^{-\beta_h (\rho - \rho_m)^2 / \lambda_0^2} \left[ \int_0^{2\pi} e^{-(\gamma + 2\rho_0\rho / L^2) \cos \varphi} d\varphi \right] d\rho.$$

Całkowanie po kącie prowadzi do

$$D_2 = -2\pi V_0 A_h^2 e^{-\rho_0^2 / L^2} \int_0^\infty \rho^3 e^{-\rho^2 / L^2} e^{-\beta_h (\rho - \rho_m)^2 / \lambda_0^2} I_0(\gamma + 2\rho_0\rho / L^2) d\rho.$$

Korzystając z  $\alpha = 2\lambda_0^2/L^2$  przekształcamy argumenty funkcji wykładniczych

$$D_2 = -2\pi V_0 A_h^2 e^{-\alpha\rho_0^2/2\lambda_0^2} e^{-\xi(\alpha/2)\rho_m^2/\lambda_0^2} \times \int_0^\infty \rho^3 e^{-\beta_h \xi(\rho - \xi\rho_m)^2/\lambda_0^2} I_0(\gamma + 2\rho_0\rho/L^2) d\rho, \quad (\text{B.6})$$

gdzie  $\xi = \beta_h/(\alpha/2 + \beta_h)$ . Argument funkcji Bessela możemy zapisać  $\gamma + q$ , gdzie  $q = \alpha(\rho_0/\lambda_0)(\rho/\lambda_0)$ . Korzystając następnie z tego, że  $q \ll 1$ <sup>1</sup> możemy rozwinąć funkcję Bessela w szereg względem  $q$

$$I_0(\gamma + q) = I_0(\gamma) + I_1(\gamma)q + \frac{1}{2} \left[ I_0(\gamma) - \frac{1}{\gamma} I_1(\gamma) \right] q^2 + \frac{1}{6\gamma} \left[ -I_0(\gamma) + \left( \frac{2}{\gamma} + \gamma \right) I_1(\gamma) \right] q^3 + \dots \quad (\text{B.7})$$

i wstawić wyrazy do trzeciego rzędu włącznie do (B.6). Wreszcie po scałkowaniu względem  $\rho$  otrzymujemy

$$D_2 = \frac{V_0 A_h^2 \lambda_0^4}{8\beta_h^2} \exp\left(-\frac{\alpha}{2} \frac{\rho_0^2}{\lambda_0^2}\right) \exp\left(-\beta_h \frac{\rho_m^2}{\lambda_0^2}\right) \times \left(\frac{\beta_h}{\frac{\alpha}{2} + \beta_h}\right)^2 \left\{ f_1(\chi) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} f_2(\chi) [1 + \Phi(\chi)] e^{\chi^2} \right\},$$

gdzie

$$\begin{aligned} f_1(\chi) &= (4h_0 + 8h_2) + (10h_1 + 33h_3)\chi + (4h_0 + 18h_2)\chi^2 \\ &\quad + (4h_1 + 28h_3)\chi^3 + 4h_2\chi^4 + 4h_3\chi^5, \\ f_2(\chi) &= (6h_1 + 15h_3) + (12h_0 + 30h_2)\chi + (24h_1 + 90h_3)\chi^2 \\ &\quad + 8(h_0 + 5h_2)\chi^3 + (8h_1 + 60h_3)\chi^4 + 8h_2\chi^5 + 8h_3\chi^6, \end{aligned}$$

$$\chi = \frac{\beta_h}{\sqrt{\frac{\alpha}{2} + \beta_h}} \frac{\rho_m}{\lambda_0},$$

$$h_i = \nu^i g_i(\gamma),$$

$$\nu = \frac{\alpha}{\sqrt{\frac{\alpha}{2} + \beta_h}} \frac{\rho_0}{\lambda_0},$$

natomiast  $g_i$  to współczynniki przy  $q^i$  w rozwinięciu (B.7).

<sup>1</sup> Dla średnich kropek  $\alpha < 0,5$  ( $\hbar\omega_0 = 10 \text{ meV}$ ; większe kropki, to mniejsze  $\alpha$ ), biorąc ponadto dużą wartość pola np.  $E = 10 \text{ kV/m}$  mamy  $\rho_0/\lambda_0 \approx 0,01$  (mniejsze pola, to mniejsze wartości  $\rho_0$ ), a wartość, dla której funkcja falowa dziury jest praktycznie równa zero to około  $\rho/\lambda_0 \approx 10$ . Dostajemy więc  $q_{maks} \approx 0,05$ .

Ze względu na unormowanie funkcji falowej trzeci człon we wzorze na energię dziury przyjmuje postać

$$D_3 = \frac{2V_0}{L^2} \left\{ \rho_0^2 - \int |\psi_h|^2 \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r} \, d\mathbf{r} \right\},$$

gdzie  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_0 = -\rho\rho_0 \cos \varphi$  z uwagi na zwrot pola elektrycznego, wtedy

$$\begin{aligned} \int |\psi_h|^2 \mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r} \, d\mathbf{r} &= -A_h^2 \rho_0 \int_0^\infty \rho^4 e^{-\beta_h(\rho-\rho_m)^2/\lambda_0^2} d\rho \int_0^{2\pi} e^{-\gamma \cos \varphi} \cos \varphi \, d\varphi \\ &= 2\pi I_1(\gamma) A_h^2 \rho_0 \int_0^\infty \rho^4 e^{-\beta_h(\rho-\rho_m)^2/\lambda_0^2} d\rho. \end{aligned}$$

Po scałkowaniu powyższego wyrażenia i wstawieniu do wzoru na  $D_3$  mamy

$$\begin{aligned} D_3 = \frac{2V_0}{L^2} \rho_0^2 \left\{ 1 - \frac{\pi I_1(\gamma) A_h^2 \lambda_0^5}{2\beta_h^{5/2} \rho_0} \left[ \zeta (5 + 2\zeta^2) e^{-\zeta^2} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\sqrt{\pi}}{2} (3 + 12\zeta^2 + 4\zeta^4) (1 + \Phi(\zeta)) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Ostatni składnik wzoru na energię dziury w naszym układzie zależy od kąta  $\varphi$  tylko poprzez człon w funkcji falowej, możemy więc od razu scałkować go po kącie  $\varphi$  w wyniku czego otrzymamy

$$\begin{aligned} D_4 = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \times \\ 2\pi I_0(\gamma) A_h^2 \int_0^\infty \rho^3 e^{-\beta_h(\rho-\rho_m)^2/\lambda_0^2} e^{-\beta_e\rho^2/2\lambda_0^2} I_0(\beta_e\rho^2/2\lambda_0^2) d\rho. \end{aligned}$$

Wprowadzamy oznaczenie

$$y = \frac{\beta_e \rho^2}{2 \lambda_0^2}$$

i korzystamy z przybliżenia [76]

$$\sqrt{y} \exp(-y) I_0(y) \approx b_0 + b_1 \frac{1}{x},$$

gdzie  $b_0 = 0.39894228$  oraz  $b_1 = 0.0498222$ , którego dokładność dla  $y > 3,75$  wynosi  $|\epsilon| < 0.003$ . Wycalkowanie tego przybliżonego wyrażenia z przesuniętym gaussianem prowadzi do błędu w obliczeniach całki, który dla najmniejszych rozważanych przez nas kropek kwantowych ( $\hbar\omega_0 = 5 \text{ meV}$ ,  $\alpha = 0,4$ ), wynosi<sup>2</sup> 0,17% i maleje wraz z rosnącym rozmiarem kropki i przyłożonym

<sup>2</sup> Błąd ten został wyliczony porównując całkę wyliczoną przy użyciu wymienionego przybliżenia z całką wyliczoną numerycznie.



polem elektrycznym.

Wracając do zmiennej  $\rho$  otrzymujemy

$$D_4 = - \frac{q^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\sqrt{\pi\beta_e}}{\lambda_0} \times \\ 2\pi I_0(\gamma) A_h^2 \left( \frac{2\lambda_0^2}{\beta_e} \right)^{3/2} \int_0^\infty e^{-\beta_h(\rho-\rho_m)^2/\lambda_0^2} \left( b_0 \frac{\beta_e}{2} \frac{\rho^2}{\lambda_0^2} + b_1 \right) d\rho,$$

co po scałkowaniu i uproszczeniach daje

$$D_4 = - \frac{\sqrt{\pi} q^2 I_0(\gamma) A_h^2 \lambda_0^3}{\sqrt{2\epsilon\epsilon_0} \beta_h^{3/2}} \times \\ \left\{ b_0 \zeta e^{-\zeta^2} + \left[ 2b_1 \frac{\beta_h}{\beta_e} + b_0 \left( \frac{1}{2} + \zeta^2 \right) \right] \sqrt{\pi} (1 + \Phi(\zeta)) \right\}.$$

Mając dane wszystkie składniki wzoru na energię dziury możemy wyznaczyć parametry wariacyjne  $\beta_h$  oraz  $\gamma$  minimalizujące energię dziury  $\varepsilon_h$ . Wyznaczamy je numerycznie szukając minimum funkcji  $\varepsilon_h(\beta_h, \gamma)$ .



# Dodatek C

## Publikacje

- J. Krasnyj, M. Tytus, W. Donderowicz, W. Jacak, A. Chuchmała, *Gaussian quantum dots of type II in in-plane electric field* Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 1944 (2007).
- J. Krasnyj, A. Chuchmała, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, *Laser action in electrically driven quantum dot matrix* Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 1950 (2007).
- J. Krasnyj, W. Donderowicz, W. Jacak, M. Tytus, *Photoluminescence structure of highly excited quantum dots of type II* Radiation Measurements **42**, 683–687 (2007).
- M. Tytus, J. Krasnyj, W. Jacak, A. Chuchmała, W. Donderowicz, L. Jacak, *Differences between photoluminescence spectra of type-I and type-II quantum dots* Journal of Physics: Conference Series **104**, 012011 (2008).
- A. Chuchmała, J. Krasnyj, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *Far-infrared laser action from parabolic quantum dots matrix* Journal of Physics: Conference Series **104**, 012012 (2008).
- M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *Exciton bound by distant ionized donor in two-dimensional GaAs/AlGaAs quantum well* Publikacja wysłana do Applied Physics Letters (arXiv:1111.2158v1).
- M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *On two-dimensional exciton bound by distant ionized-donor in a narrow quantum well* (arXiv:1111.2518v1).



# Bibliografia

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1998).
- [2] T. Chakraborty, *Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms* (Elsevier, Amsterdam, 1999).
- [3] R. C. Ashoori, *Nature* **379**, 413 (1996).
- [4] L. Jacak, A. Wójs, P. Machnikowski, *Semiconductor Quantum Dots*, w: *Encyklopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, (American Scientific Publishers, 2004) [www.aspbs.com/enn](http://www.aspbs.com/enn).
- [5] L. P. Kouwenhoven, C. M. Marcus, *Physics World* **11**, 35 (1998).
- [6] S. M. Reimann, M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [7] S. Fafard, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion, J. McCaffrey, Y. Feng, S. Charbonneau, *Science* **274**, 1350 (1996).
- [8] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, L. Bujkiewicz, *Phys. Rev. A* **65**, 063813 (2002).
- [9] J. Krasnyj, A. Chuchmała, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, *Phys. Stat. Sol. (a)* **204**, 1950 (2007).
- [10] A. Chuchmała, J. Krasnyj, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *Journal of Physics: Conference Series* **104**, 012012 (2008).
- [11] N. Kirstaedter, N. N. Ledentsov, M. Grudmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, S. S. Ruvimov, N. V. Maximov, P. S. Kop'ev, Z. J. Alferov, V. Richter, P. Werner, V. Gösele, J. Heydenreich, *Electron. Lett.* **30**, 1416 (1994).
- [12] K. Imamura, Y. Sugiyama, Y. Nakata, S. Muto, N. Yokoyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L1445 (1995).

- 
- [13] R. B. Laghumavarapu, A. Moscho, A. Khoshakhlagh, M. El-Emawy, L. F. Lester, D. L. Huffaker, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 173125 (2007).
- [14] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W. V. Schoenfeld, P. M. Petroff, Lidong Zhang, E. Hu, A. Imamoglu, *Science* **290**, 2282 (2000).
- [15] C. Becher, A. Kiraz, P. Michler, W. V. Schoenfeld, P. M. Petroff, Lidong Zhang, E. Hu, A. Imamoglu, *Physica E* **13**, 412 (2002).
- [16] J. Vučković, D. Fattal, C. Santori, G. S. Solomon, Y. Yamamoto, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3596 (2003).
- [17] A. Zrenner, E. Beham, S. Stuffer, F. Findeis, M. Bichler, G. Abstreiter, *Nature* **418**, 612 (2002).
- [18] S. Komiyama, O. Astafiev, V. Antonov, T. Kutsuwa, H. Hirai, *Nature* **403**, 405 (2000).
- [19] L. Goldstein, F. Glas, J. Y. Marzin, M. N. Charasse, G. L. Roux, *Applied Physics Letters* **47**, 1099 (1985).
- [20] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C. M. Reaves, S. P. Denbaars, P. M. Petroff, *Applied Physics Letters* **63**, 3203 (1993).
- [21] D. Leonard, K. Pond, P. M. Petroff, *Physical Review B* **50**, 11687 (1994).
- [22] P. M. Petroff, S. P. Denbaars, *Superlattices and Microstructures* **15**(1), 15 (1994).
- [23] M. A. Reed, R. T. Bate, K. Bradshaw, W. M. Duncan, W. M. Frensley, J. Lee, H. D. Smith, *J. Vacuum Sci. Technol. B*, **4**, 358 (1986).
- [24] C. Schüller, *Inelastic Light Scattering of Semiconductor Nanostructures* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2006).
- [25] A. Zrenner, L. V. Butov, M. Hagn, G. Abstreiter, G. Böhm, G. Weimann, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3382 (1994).
- [26] D. Gammon, E. S. Snow, B. V. Shanabrook, D. S. Katzer, D. Park, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3005 (1996).
- [27] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore, A. E. Wetsel, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 535 (1988).
- [28] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, L. N. Pfeifer, S. J. Pearton, K. W. Baldwin, K. West, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3088 (1992).

- [29] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, L. N. Pfeifer, K. W. Baldwin, K. West, Phys. Rev. Lett. **71**, 613 (1993).
- [30] W. Hansen, T. P. Smith, K. Y. Lee, J. A. Brum, C. M. Knoedler, J. M. Hong, D. P. Kern, Phys. Rev. Lett. **62**, 2168 (1989).
- [31] A. Lorke, J. P. Kotthaus, K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **64**, 2559 (1990).
- [32] B. Meurer, D. Heitmann, K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **68**, 1371 (1992).
- [33] C. Sikorski, U. Merkt, Phys. Rev. Lett. **62**, 2164 (1989).
- [34] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L.M. K. Vandersypen, Rev. Mod. Phys. **79**, 1217 (2007).
- [35] K. Brunner, U. Bockelmann, G. Abstreiter, W. Walther, G. Böhm, G. Tränkle, G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **69**, 3216 (1992).
- [36] U. Bockelmann, W. Heller, A. Filoramo, Ph. Roussignol, Phys. Rev. B **55**, 4456 (1997).
- [37] U. Bockelmann, W. Heller, G. Abstreiter, Phys. Rev. B **55**, 4469 (1997).
- [38] C. E. Pryor, M.-E. Pistol, Phys. Rev. B **72**, 205311 (2005).
- [39] J. A. Prieto, G. Armelles, T. Utzmeier, F. Briones, J. C. Ferrer, F. Peiro, A. Cornet, J. R. Morante, Phys. Rev. Lett. **80**, 1094 (1998).
- [40] T. Utzmeier, J. Tamayo, P. A. Postigo, R. Garcia, F. Briones, J. Chem. Phys. **175**, 725 (1997).
- [41] J. Gaj, P. Kossacki, *Elektrony i dziury, ekscytyny i triony w półprzewodnikach* Postępy Fizyki **53D** (2002).
- [42] J. B. Brojan, J. Mostowski, K. Wódkiewicz, *Zbiór zadań z mechaniki kwantowej* Państwowe Wydawnictwo Naukowe (Warszawa 1978).
- [43] J. Krasnyj, W. Donderowicz, W. Jacak, M. Tytus, Radiation Measurements **42**, 683–687 (2007).
- [44] W. Salejda, M. H. Tyc, M. Just, *Algebraiczne Metody Rozwiązywania Równania Schrödingera* (PWN 2002).
- [45] P. D. Wang, J. L. Merz, S. Fafard, R. Leon, D. Leonard, G. Medeiros-Ribeiro, M. Oestreich, P. M. Petroff, K. Uchida, N. Miura, H. Akiyama, H. Sakaki, Phys. Rev. B **53**, 458 (1996).

- 
- [46] L. R. Wilson, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, M. Morifuji, M. J. Steer, I. A. Larkin, M. Hopkinson, Phys. Rev. B **57**, 2073 (1998).
- [47] M. Hayne, J. Maes, V. V. Moshchalkov, Y. M. Manz, O. G. Schmidt, K. Eberl, Appl. Phys. Lett. **79**, 45 (2001).
- [48] A. Kumar, S. E. Laux, F. Stern, Phys. Rev. B **42**, 5166 (1990).
- [49] J. Alsmeier, E. Batke, J. P. Kotthaus, Phys. Rev. B **41**, 1699 (1990).
- [50] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Phys. Rev. B **64**, 195303 (2001).
- [51] S. Bednarek, B. Szafran, K. Lis, J. Adamowski, Phys. Rev. B **68**, 155333 (2003).
- [52] K. Lis, S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, Physica E **17**, 494 (2003).
- [53] L. Jacak, J. Krasnyj, M. Korkusiński, A. Wójs, Phys. Rev. B **57**, 9069 (1998).
- [54] L. D. Landau, E. M. Lifszyc, *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna* (Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1979).
- [55] R. Shankar *Mechanika kwantowa* (Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007).
- [56] Yung-Kuo Lim (Edytor) *Problems and Solutions on Quantum Mechanics: Major American Universities Ph.D. Qualifying Questions and Solutions* (World Scientific Publishing 1998).
- [57] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1998).
- [58] D. ter Haar *Selected Problems in Quantum Mechanics* (Academic Press, New York, 1964).
- [59] B. Simon, Ann. Phys. **97**, 279 (1976).
- [60] N. Arkani-Hamed, S. Dimopoulos, G. Dvali, Phys. Lett. B **459**, 363 (1998).
- [61] L. Randall, R. Sundrum, Phys. Rev. Lett. **83**, 4690 (1999).
- [62] M. M. Nieto, Phys. Lett. A **293**, 10 (2002).
- [63] R. Koley, S. Kar, Phys. Lett. A **363**, 369 (2006).



- [64] K. Yang, M. de Llano, *Am. J. Phys.* **57**, 85 (1989).
- [65] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [66] W. F. Buell, B. A. Shadwick, *Am. J. Phys.* **63**, 256 (1995).
- [67] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction* (Cambridge University Press, 1998).
- [68] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **35**, 210 (1930).
- [69] V. Fock, *Z. Physik* **61**, 126 (1930).
- [70] M. Braskén, M. Lindberg, D. Sundholm, J. Olsen, *Phys. Rev. B* **61**, 7652 (2000).
- [71] F. M. Peeters, V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [72] M. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
- [73] K. S. Dy, Shi-Yu Wu, T. Spratlin, *Phys. Rev. B* **20**, 4237 (1979).
- [74] Zheng Zhao-bo, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **19**, L689 (1986).
- [75] K. L. Janssens, B. Partoens, F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **64**, 155324 (2001).
- [76] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, (U.S. GPO, Washington, D.C., 1970).
- [77] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics, Vol. 1* (Wiley-Interscience, New York, 1962).
- [78] C. G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **39**, 1871 (1989).
- [79] B. Wang, S.-J. Chua, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 628 (2001).
- [80] O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook* (Springer, Berlin, 2004).
- [81] E. Ribeiro, R. L. Maltez, W. Carvalho, Jr., D. Ugarte, G. Medeiros-Ribeiro, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2953 (2002).
- [82] M. P. F. de Godoy, P. F. Gomes, M. K. K. Nakaema, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, R. A. Caetano, J. R. Madureira, J. R. R. Bortoletto, M. A. Cotta, E. Ribeiro, G. E. Marques, A. C. R. Bittencourt, *Phys. Rev. B* **73**, 033309 (2006).

- 
- [83] U. Bockelmann, Phys. Rev. B **48**, 16637 (1993).
- [84] U. Bockelmann, K. Brunner, G. Abstreiter, Solid-State Electron. **37**, 1109 (1994).
- [85] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [86] N. Byers, C. N. Yang, Phys. Rev. Lett. **7**, 46 (1961).
- [87] F. Bloch, Phys. Rev. Lett. **21**, 1241 (1968).
- [88] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, Phys. Lett. **96A**, 365 (1983).
- [89] E. Ribeiro, A. O. Govorov, W. Jr. Carvalho, G. Medeiros-Ribeiro, Phys. Rev. Lett. **92**, 126402 (2004).
- [90] M. H. Degani, M. Z. Maialle, G. Medeiros-Ribeiro, E. Ribeiro, Phys. Rev. B **78**, 075322 (2008).
- [91] I. L. Kuskovsky, W. MacDonald, A. O. Govorov, L. Mourokh, X. Wei, M. C. Tamargo, M. Tadic, F. M. Peeters, Phys. Rev. B **76**, 035342 (2007).
- [92] I. R. Sellers, V. R. Whiteside, I. L. Kuskovsky, A. O. Govorov, B. D. McCombe, Phys. Rev. Lett. **100**, 136405 (2008).
- [93] I. R. Sellers, V. R. Whiteside, A. O. Govorov, W. C. Fan, W-C. Chou, I. Khan, A. Petrou, B. D. McCombe, Phys. Rev. B **77**, 241302(R) (2008).
- [94] S. Miyamoto, O. Moutanabbir, T. Ishikawa, M. Eto, E. E. Haller, K. Sawano, Y. Shiraki, K. M. Itoh, Phys. Rev. B **82**, 073306 (2010).
- [95] V. Fock, Z. Phys. **47**, 446 (1928).
- [96] I. V. Lerner, Yu. E. Lozovik, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **78**, 1167 (1980). [Sov. Phys. JETP **51**, 588 (1980)].
- [97] V. Halonen, T. Chakraborty, P. Pietilainen, Phys. Rev. B **45**, 5980 (1992).
- [98] F. Hatami, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, J. Böhrer, F. Heinrichsdorff, M. Beer, D. Bimberg, S. S. Ruvimov, P. Werner, U. Gösele, J. Heydenreich, U. Richter, S. V. Ivanov, B. Ya. Meltser, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferov, Appl. Phys. Lett. **67**, 656 (1995).
- [99] A. S. Dissanayake, J. Y. Lin, H. X. Jiang, Phys. Rev. B **51**, 5457 (1995).

- 
- [100] G. W. Wen, J. Y. Lin, H. X. Jiang, Z. Chen, Phys. Rev. B **52**, 5913 (1995).
- [101] H. Fu, Phys. Rev. B **65**, 045320 (2002).
- [102] K. L. Janssens, B. Partoens, F. M. Peeters, Phys. Rev. B **65**, 233301 (2002).
- [103] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, A. Wójs, Phys. Low-Dim. Struct. **7/8**, 107 (2002).
- [104] W. Heller, U. Bockelmann, G. Abstreiter, Phys. Rev. B **57**, 6270 (1998).
- [105] A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, V. V. Ulyanov, A. G. Milekhin, A. O. Govorov, S. Schulze, D. R. T. Zahn, Phys. Rev. B **67**, 125318 (2003).
- [106] J. Krasnyj, M. Tytus, W. Donderowicz, W. Jacak, A. Chuchmała, Phys. Stat. Sol. (a) **204**, 1944 (2007).
- [107] M. A. Lampert, Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1958).
- [108] T. Skettrup, M. Suffczynski, W. Gorzkowski, Phys. Rev. B **4**, 512 (1971).
- [109] L. Stauffer, B. Stébé, Phys. Rev. B **39**, 5345 (1989).
- [110] W. Y. Ruan, Yia-Chung Chang, Phys. Rev. B **66**, 115314 (2002).
- [111] W. Xie, J. Gu, Physica B **337**, 58 (2003).
- [112] J. J. Liu, S. F. Zhang, Y. X. Li, X. J. Kong, Eur. Phys. J. B **19**, 17 (2001).
- [113] D. C. Reynolds, C. E. Leak, K. K. Bajaj, C. E. Stutz, R. L. Jones, K. R. Evans, P. W. Yu, W. M. Theis, Phys. Rev. B **40**, 6210 (1989).
- [114] I. C. da Cunha Lima, A. Ghazali, P. D. Emmel, Phys. Rev. B **54**, 13996 (1996).
- [115] B. Stébé, I. Essaoudi, A. Ainane, M. Saber, Phys. Rev. B **64**, 085304 (2001).