

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ВОЗДУШНОГО ТРАНСПОРТА
(РОСАВИАЦИЯ)

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ГРАЖДАНСКОЙ АВИАЦИИ» (МГТУ ГА)

Кафедра физики

С.М. Новиков, С.К. Камзолов

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СОВРЕМЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Учебно-методическое пособие
по выполнению лабораторной работы КС-7К
«Оценка эффективной массы экситонов
в квантовых точках из CdSe»

*для студентов
всех направлений и специальностей
всех форм обучения*

Москва
ИД Академии Жуковского
2021

УДК 539.2
ББК 53
H72

Рецензент:

Захарченко К.В. – канд. физ.-мат. наук, доцент

Новиков С.М.

H72 Физические основы современных технологий [Текст] : учебно-методическое пособие по выполнению лабораторной работы КС-7К «Оценка эффективной массы экситонов в квантовых точках из CdSe» / С.М. Новиков, С.К. Камзолов. – М.: ИД Академии Жуковского, 2021. – 12 с.

Данное учебно-методическое пособие издается в соответствии с рабочей программой учебной дисциплины «Физические основы современных технологий» по учебному плану для студентов всех направлений и специальностей всех форм обучения.

Рассмотрено и одобрено на заседаниях кафедры 17.12.2020 г. и методического совета 22.12.2020 г.

**УДК 539.2
ББК 53**

В авторской редакции

Подписано в печать 18.05.2021 г.
Формат 60x84/16 Печ. л. 0,75 Усл. печ. л. 0,7
Заказ № 754/0330-УМП22 Тираж 80 экз.

Московский государственный технический университет ГА
125993, Москва, Кронштадтский бульвар, д. 20

Издательский дом Академии имени Н. Е. Жуковского
125167, Москва, 8-го Марта 4-я ул., д. 6А
Тел.: (495) 973-45-68
E-mail: zakaz@itsbook.ru

Квантовые точки – это искусственные атомы, свойствами которых можно управлять.

*Ж.И. Алферов,
лауреат Нобелевской премии*

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА КС-7К «ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ЭКСИТОНОВ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ ИЗ CdSe»

1. Цель работы

Изучение физических основ использования полупроводниковых квантовых точек в современных технологиях. Экспериментальное определение зависимости длины волны люминесцентного излучения квантовых точек из CdSe от их радиуса. Определение эффективной массы экситонов в квантовых точках из CdSe.

2. Подготовка к работе

Изучите теоретический материал по лекциям или учебникам [1, 2]: уравнение Шредингера, частица в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме, квантование энергии, энергетические зоны в кристаллах, энергетическая диаграмма полупроводниковых квантовых точек. Прочтите разделы 3 и 4 методического описания. Ознакомьтесь с устройством виртуального лабораторного стенда, порядком проведения измерений и обработки их результатов по методическому описанию. Подготовьте проект отчета по лабораторной работе, а также ответы на вопросы из раздела 7 данного описания.

3. Краткая теория

Квантовыми точками называют нанокристаллы с характерным размером от 2 до 10 нанометров, состоящие из $10^3 - 10^5$ атомов. Поэтому в их оптоэлектронных свойствах ключевую роль играют квантово-размерные эффекты. Энергетический спектр электронов в квантовой точке принципиально отличается от спектра в объемном полупроводнике. Напомним основные положения зонной теории кристаллов. Электрон в кристалле ведет себя как в трехмерной потенциальной “яме” конечной глубины. Из решения уравнения Шредингера для такого случая следует, что энергия электрона может принимать только дискретные значения, которые принято отмечать горизонтальными линиями рядом с осью энергий как на рис. 1 (обычно ось энергий даже не рисуют). Кроме того, весь спектр энергий оказывается разбит на **зоны разрешенных и запрещенных значений**. Разрешенная зона, в которой энергетические уровни заполнены валентными электронами (участвующими в образовании химических связей), называется

валентной. Выше нее по оси энергий расположена запрещенная зона и свободная зона (в полупроводниках она является зоной проводимости). На рис. 1 разрешенные зоны отмечены как валентная и зона проводимости. Между ними находится запрещенная зона. Подробнее об энергетических зонах в кристаллах можно прочитать в рекомендуемой литературе [1, т.5, п. 8.2].

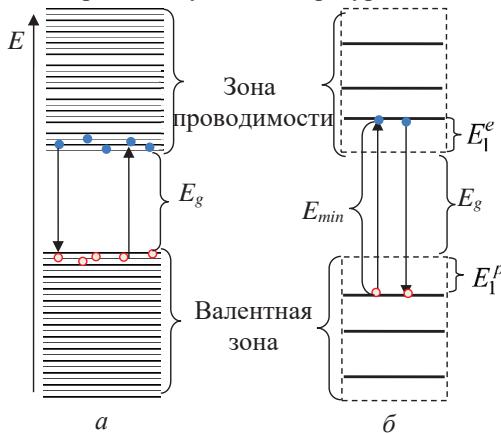


Рис. 1. а) энергетический спектр электронов в объемном кристалле, б) уровни энергии и волновые функции электрона и дырки в квантовой точке.

ком). При рабочих температурах часть электронов переходит из валентной зоны в зону проводимости (в соответствии с распределением Больцмана). На месте каждого ушедшего из валентной зоны электрона образуется область с избытком положительного заряда, что эквивалентно появлению квазичастицы с положительным зарядом, получившей название **дырки**. На рис. 1 электроны и дырки условно обозначены как темные и светлые кружочки соответственно. При включении электрического поля электроны в зоне проводимости приобретают дополнительную энергию, переходя на свободные, более высокие энергетические уровни. Дырки также имеют возможность участвовать в электропроводности.

Важно, что разность энергий соседних энергетических уровней в разрешенных зонах обратно пропорциональна квадрату характерного размера кристалла l , т. е. $\sim 1/l^2$. Например, для кристалла с характерным размером $l \approx 1$ мм разность энергий соседних уровней примерно равна 10^{-14} эВ. Поэтому, для объемного кристалла спектр энергий оказывается почти сплошным (квазинепрерывным) (рис. 1а). При этом, уровень с наивысшим значением энергии в валентной зоне практически совпадает с ее **потолком**, а уровень с наименьшим значением энергии в зоне проводимости практически совпадает с ее **дном**. При нанометровом размере кристалла разность энергий соседних уровней становится порядка 1

В полупроводниках при температуре 0 К на каждом энергетическом уровне в валентной зоне находится по два электрона с противоположными спинами, а на уровнях в зоне проводимости электроны отсутствуют. При этом валентные электроны не могут участвовать в электропроводности. Дело в том, что в этом случае их кинетическая энергия должна увеличиться, что равноценно переходу на более высокий энергетический уровень на диаграмме. Но выше валентной зоны расположена зона запрещенных значений энергии. Поэтому, и электропроводность при 0 К равна нулю (т.е. полупроводник является диэлектриком).

эВ. Поэтому в кристалле нанометрового размера в пределах разрешенных зон имеется всего несколько стационарных уровней энергии для электрона и, соответственно, для дырки (рис. 1б).

Если квантовая точка из полупроводника представляет собой сферу радиусом R , то самое низкое разрешенное энергетическое состояние для электронов в зоне проводимости (отсчитанное от дна) определяется по формуле

$$E_1^e = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* R^2}, \quad (1)$$

где m_e^* – эффективная масса электрона в кристалле. Аналогичную формулу можно записать для энергии дырки, отсчитанную вниз от потолка валентной зоны (рис.1б)

$$E_1^p = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_p^* R^2}, \quad (2)$$

где m_p^* – эффективная масса дырок.

При рабочих температурах в полупроводниках идет непрерывный процесс либо образования пары электрон + дырка, либо их рекомбинация (исчезновение) вследствие перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости или обратно. На рис. 1 эти процессы обозначены стрелками. Естественно, что при таких переходах между энергетическими уровнями происходит либо поглощение, либо излучение кванта энергии (аналогично переходу между уровнями энергии в атомах).

Величина кванта энергии в объемном кристалле зависит от ширины запрещенной зоны E_g (рис. 1а), которая стандартна для каждого типа полупроводника. В квантовой точке эта величина существенно другая. В этом случае необходимо учитывать, что электрон с дыркой образуют двухчастичную систему, связанную кулоновским взаимодействием – **эксситон**. Экситоны – квазичастицы, обладающие одновременно корпускулярными и волновыми свойствами. Они могут свободно перемещаться по кристаллу и играют большую роль в формировании его оптоэлектронных свойств. Движение экситона в квантовой точке ограничено её физическими границами (размер квантовой точки сравним с характерным размером экситона в объемном полупроводнике).

Минимальная энергия E_{\min} необходимая для создания электронно-дырочных пар (эксситонов) в квантовой точке называется **эффективной шириной запрещенной зоны**. Она включает, по крайней мере, четыре составляющие. Первая составляющая – это ширина запрещенной зоны E_g полупроводника макроскопических размеров, из которого изготовлена данная квантовая точка. Другая важная составляющая представляет собой минимальную энергию $E_{\text{кв}}$ определяемую условиями квантового ограничения для электронов и дырок в квантовой точке (см. формулы 1 и 2):

$$E_{\text{кв}} = E_1^e + E_1^p = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^* R^2} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_p^* R^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2R^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_p^*} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* R^2}, \quad (3)$$

где m_e^* и m_p^* – эффективные массы электронов и дырок соответственно, m^* – **эффективная масса экситона** $\left(\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_p^*} \right)$. Третья составляющая определяется кулоновским взаимодействием электрона и дырки. Для сферической квантовой точки, изготовленной из материала с диэлектрической проницаемостью ϵ ее можно определить по формуле

$$E_k = -\frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon R}. \quad (4)$$

Четвертая составляющая учитывает взаимодействие экситона с поверхностью нанокристалла. Ее можно записать в упрощенной форме в виде

$$E_n = \frac{\alpha}{R}, \quad (5)$$

где α – некоторая константа.

Таким образом, учитя, что $E_{\min} = E_g + E_{\text{кв}} + E_k + E_n$, получаем формулу для расчета минимальной энергии E_{\min} необходимой для создания экситона (или выделяющейся при его рекомбинации):

$$E_{\min} = E_g + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* R^2} - \frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon R} + \frac{\alpha}{R}. \quad (6)$$

Данное выражение можно использовать для оценки зависимости длины волны излучения квантовой точки от ее размера. Из него следует, что частотами переходов, т.е. длиной волны поглощения или излучения, легко управлять, меняя размеры квантовой точки. Таким образом, рассчитав необходимые размеры полупроводниковой структуры, можно создать светодиоды любого цвета. В терминах электроники полупроводниковых материалов это можно назвать возможностью контроля эффективной ширины запрещенной зоны.

Квантовые точки могут возбуждаться светом или электрическим током, но в ответ всегда будут светить "правильным", как говорят физики, монохромным светом. Еще одним преимуществом устройств с квантовыми точками является высочайшая яркость - до 9000 Кд/кв. м. К примеру, яркость современных дисплеев не превышает значения в 500 Кд/кв.м.

Исследования квантовых точек начались сравнительно недавно, но широкий перспективы их практического использования уже очевидны. Зависимость энергетического спектра от размера дает огромный потенциал для практического применения квантовых точек. Квантовые точки могут найти применения в оптоэлектрических системах, таких как светоизлучающие диоды и плоские светоизлучающие панели, лазеры, ячейки солнечных батарей и фотоэлектрических преобразователей. Также перспективно их использование как базовых элементов

квантовых компьютеров, одноэлектронных транзисторов, как биологических маркеров в медицине и т.д.

4. Методика проведения эксперимента и описание установки

При разработке элементов наноэлектроники параметры, входящие в формулу (6), играют важную роль, что требует их предварительное экспериментальное определение. В частности, для измерения эффективной массы экситона можно использовать зависимость энергии излучаемого при его рекомбинации фотона от радиуса квантовой точки. Для этого преобразуем формулу (6) к виду

$$E_{\min} = ax^2 + bx + c, \quad (7)$$

где параметры $a = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*}$, $b = -\frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon}$, $c = E_g$, а роль переменной играет

$$x = \frac{1}{R}.$$

Измерив длины волн излучения квантовых точек различного радиуса, можно построить график зависимости E_{\min} от x . Затем с помощью компьютерных методов его обработки определить параметры a , b и c , знание которых дает возможность рассчитать эффективную массу экситонов m^* и ширину запрещенной зоны E_g полупроводника макроскопических размеров

$$m^* = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2a}, \quad E_g = c. \quad (8)$$

Исследование свойств квантовых точек в условиях лаборатории вуза затруднительно. Поэтому в данной лабораторной работе используется компьютерный симулятор, разработанный студентами факультета ПМиВТ МГТУ ГА А.М. Ворожейкиным и Д.П. Головиной. Виртуальный лабораторный стенд на экране компьютера имеет вид, представленный на рис. 2. На полке находится набор колб с коллоидными растворами квантовых точек CdSe различного радиуса. Значения радиусов (в нм!) указаны в табличках под кюветами. На столе размещены источник ультрафиолетового света (УФ), спектрометр (СП) и монитор (М). На пути ультрафиолетового света устанавливается одна из колб с квантовыми точками, которые начинают излучать свет (люминесцировать). Длина волны излучения определяется радиусом квантовых точек. На экран монитора выводится изображение спектра излучения квантовых точек, полученного с помощью видеокамеры, расположенной внутри спектрометра.

5. Порядок выполнения работы

Найдите на рабочем столе лабораторного компьютера ярлык папки «Виртуальные ЛР», откройте её с помощью левой кнопки компьютерной мыши. Запустите программу «Квантовые точки» из этой папки. На экране монитора

появится изображение виртуального лабораторного стенда (рис. 2). Разверните изображение во весь экран. С помощью курсора включите источник УФ и монитор М (красные кнопки на их корпусах).

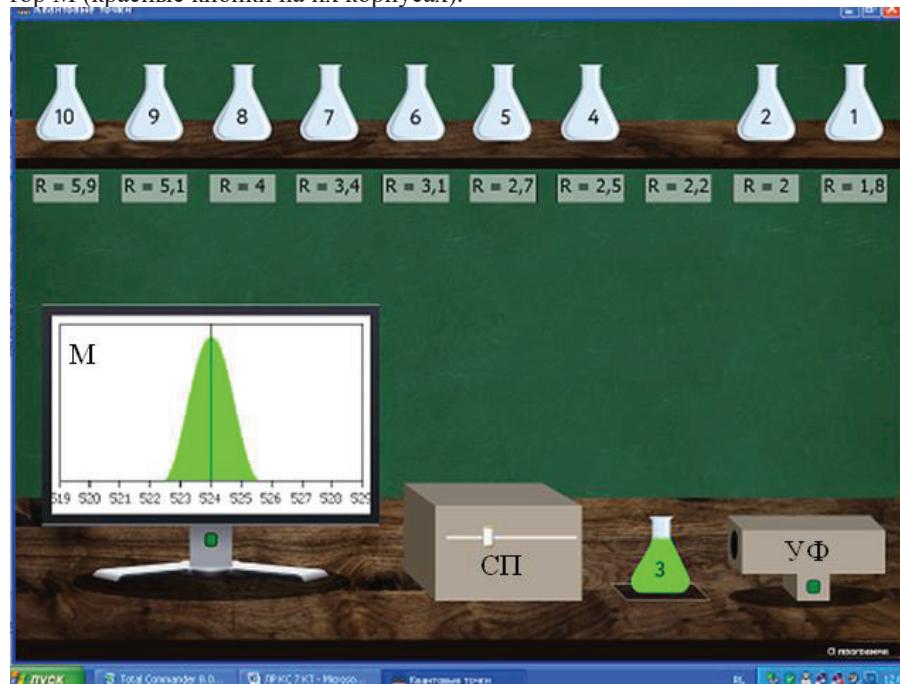


Рис. 2.

5.1. Щелкнув левой кнопкой мышки по одной из колб на полке, переместите ее на коврик между источником УФ и спектрометром СП (рекомендуется начинать с первой колбы). Плавно перемещая с помощью курсора ползунок на корпусе спектрометра влево или вправо, добейтесь появления спектра излучения квантовых точек в центре экрана монитора. Измерьте по шкале на экране монитора длину волны излучения, соответствующую максимуму. Запишите значения радиуса квантовых точек в этой колбе и длины волны их излучения в соответствующие ячейки табл. 1. Соблюдайте размерность величин, указанную в табл. 1. Для удобства последующей компьютерной обработки результатов эксперимента рекомендуется записывать все цифры в табл. 1 в экспоненциальной форме. Например, одна из строк в табл. 1 содержит нежелательную форму представления чисел, а вторая – рекомендуемую. Уберите колбу с коврика на ее место на полке с помощью щелчка левой кнопки мышки.

5.2. Проделайте аналогичные измерения длин волн излучения квантовых точек в остальных колбах. Запишите результаты в табл. 1.

Последнюю колбу поставьте на полку. Выключите источник ультрафиолетового излучения УФ и монитор М с помощью зеленых кнопок на них.

6. Обработка результатов измерений и оформление отчёта

6.1. Для каждого значения радиуса квантовых точек в табл. 1 рассчитайте величины $x = \frac{1}{R}$ и запишите результаты в соответствующие ячейки табл. 1 (в рекомендуемом формате).

6.2. Для каждого значения длины волны излучения квантовых точек в табл. 1 рассчитайте энергию фотонов, которая соответствует величине минимальной энергии $E_{\min} = \frac{hc}{\lambda}$, необходимой для создания экситона. Запишите результаты в соответствующие ячейки табл. 1.

6.3. Войдите в папку «Обработка результатов ЛР», расположенную на рабочем столе лабораторного компьютера и откройте файл «Расчет ЛР КС-7К.xls».

Скопируйте из табл. 1 значения E_{\min} и $\frac{1}{R}$ в ячейки таблицы открытого файла.

Программа сгенерирует график зависимости E_{\min} от $\frac{1}{R}$. На графике появится уравнение полинома второй степени. Перепишите коэффициенты a , b и c из этого уравнения в табл. 2.

6.4. С помощью формул (8) рассчитайте эффективную массу экситонов m^* и ширину запрещенной зоны E_g полупроводника макроскопических размеров (в эВ). Рассчитайте отношение эффективной массы экситонов к массе покоя электрона $\frac{m^*}{m_e}$. Результаты запишите в табл. 2.

6.5. Преобразовав формулу (3) к виду

$$E_{\text{кв}} = E_1^e + E_1^p = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* R^2} = \frac{a}{R^2},$$

рассчитайте минимальную энергию $E_{\text{кв}}$, определяемую условиями квантового ограничения для электронов и дырок в двух квантовых точках: минимального и максимального радиуса. Рассчитайте отношение $\frac{E_{\text{кв}}}{E_g}$ для выбранных квантовых точек и запишите результат в табл. 3.

6.6. Постройте в масштабе энергетические диаграммы для выбранных в п. 6.5 квантовых точек по образцу рис. 1б. Для этого примите, что $E_1^e \approx E_1^p \approx \frac{1}{2} E_{\text{кв}}$. На диаграмме укажите только ближние к запрещенной зоне уровни.

Таблица 1

| № колбы | R точки, м | λ , м | $1/R$, м ⁻¹ | E_{\min} , Дж |
|---------|---------------------|---------------------|----------------------------|-----------------------|
| 1. | | | | |
| 2. | | | | |
| 3. | | | | |
| 4. | $2,1 \cdot 10^{-9}$ | $503 \cdot 10^{-9}$ | $4,76 \cdot 10^{+8}$ | $3,95 \cdot 10^{-19}$ |
| 5. | 2,1E-9 | 503E-9 | 4,76E+08 | 3,95E-19 |
| 6. | | | | |
| 7. | | | | |
| 8. | | | | |
| 9. | | | | |
| 10. | | | | |

Таблица 2

| a , Дж·м ² | b , Дж·м | c , Дж | m^* , кг | E_g , эВ | $\frac{m^*}{m_e}$ |
|----------------------------|---------------|-------------|---------------|---------------|-------------------|
| | | | | | |

Таблица 3

| R точки, м | $E_{\text{кв}}$, эВ | $\frac{E_{\text{кв}}}{E_g}$ |
|-----------------|-------------------------|-----------------------------|
| $R_1 =$ | | |
| $R_{10} =$ | | |

7. Вопросы для допуска к лабораторной работе

- 7.1. Почему квантовые точки иногда называют искусственными атомами?
- 7.2. В чем различие энергетических спектров в объемном кристалле и в квантовой точке?
- 7.3. С помощью энергетической диаграммы на рис. 1б поясните механизм люминесценции квантовых точек.
- 7.4. Из каких слагаемых состоит величина минимальной энергии E_{\min} необходимой для создания экситона (или выделяющейся при его рекомбинации)?
- 7.5. Как энергия излучаемых фотонов зависит от размера квантовых точек?
- 7.6. Как измеряется спектр излучения квантовых точек в данной лабораторной работе?
- 7.7. Возможно ли свечение квантовой точки при инжекции в нее электронов и дырок?
- 7.8. Как эффективная масса экситона связана с эффективными массами электрона и дырки?

8. Литература

1. Савельев И.В. Курс общей физики. Кн. 5. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. М.: Наука (или другие издательства), 2012 – 2018 г.г.
2. Шишкин Г.Г., Агеев И.М. Наноэлектронника. Элементы, приборы, устройства: Пособие–М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2012–408 с.

Содержание

| | Стр. |
|--|------|
| 1. Цель работ..... | 3 |
| 2. Подготовка к работам..... | 3 |
| 3. Краткая теория | 3 |
| 4. Методика проведения эксперимента и описание установки... | 7 |
| 5. Порядок выполнения работы | 7 |
| 6. Обработка результатов измерений и оформление отчёта | 9 |
| 7. Вопросы для допуска к лабораторной работе | 11 |
| 8. Литература | 11 |