

кілька стаціонарних рівнів енергії для електрона та дірки з характерною відстанню між ними $\hbar^2 / (2md^2)$, де d – розмір нанокристалу (квантової точки) (рис.1б). Таким чином, енергетичний спектр квантової точки залежить від її розміру. Аналогічно переходу між рівнями енергії в атомі при переході носіїв заряду між енергетичними рівнями в квантовій точці може випромінюватись або поглинатися фотон. Частотами переходів, тобто довжиною хвилі поглинання або люмінесценції легко керувати, змінюючи розміри квантової точки (рис.2). Тому квантові точки іноді називають "штучними атомами". У термінах напівпровідникових матеріалів можна назвати можливістю контролю ефективної ширини забороненої зони.

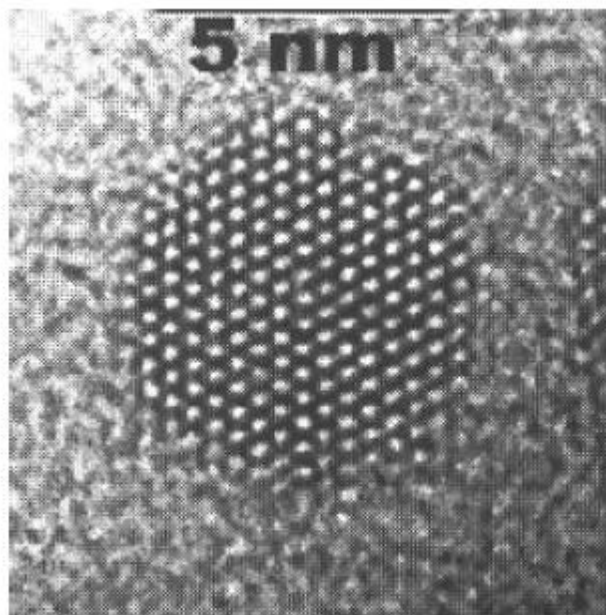


Рисунок 2 Люмінесценція зразків квантових точок CdSe з розміром в діапазоні 2.0-5.5 нм, виготовлені у вигляді золів. Вгорі – без підсвічування, внизу – підсвічування ультрафіолетовим випромінюванням.

Є ще одна важлива властивість, що відрізняє колоїдні квантові точки від традиційних напівпровідникових матеріалів – можливість існування у вигляді розчинів, чи точніше у вигляді золів. Ця властивість забезпечує

широту можливостей маніпулювання такими об'єктами та робить їх привабливими для технологій.

Залежність енергетичного діапазону від розміру дає великий потенціал для практичного застосування квантових точок. Квантові точки можуть знайти застосування в оптоелектричних системах, таких як світловипромінюючі діоди та плоскі світловипромінюючі панелі, лазери, осередки сонячних батарей та фотоелектричних перетворювачів, як біологічні маркери, тобто. скрізь, де потрібно варіювати оптичні властивості, що перебудовуються по довжині хвилі. Здатність існувати у вигляді золів (розчинів) дозволяє легко отримувати покриття із плівок квантових точок дешевими методами, наприклад spin-coating, або наносити квантові точки за допомогою струминного друку на будь-які поверхні. Всі ці технології дозволяють уникнути створення пристроїв на основі квантових точок дорогих вакуумних технологій, традиційних для мікроелектронної техніки. Також за рахунок розчинних технологій можна вводити квантові точки в відповідні матриці і створювати композитні матеріали.



На цій фотографії, отриманій за допомогою електронного мікроскопа, показано реальну картину ансамблю квантових точок на основі фосфіду InP. Електрони всередині кожного монокристала замкнені у потенційній ямі, їх рух обмежений у всіх напрямках.

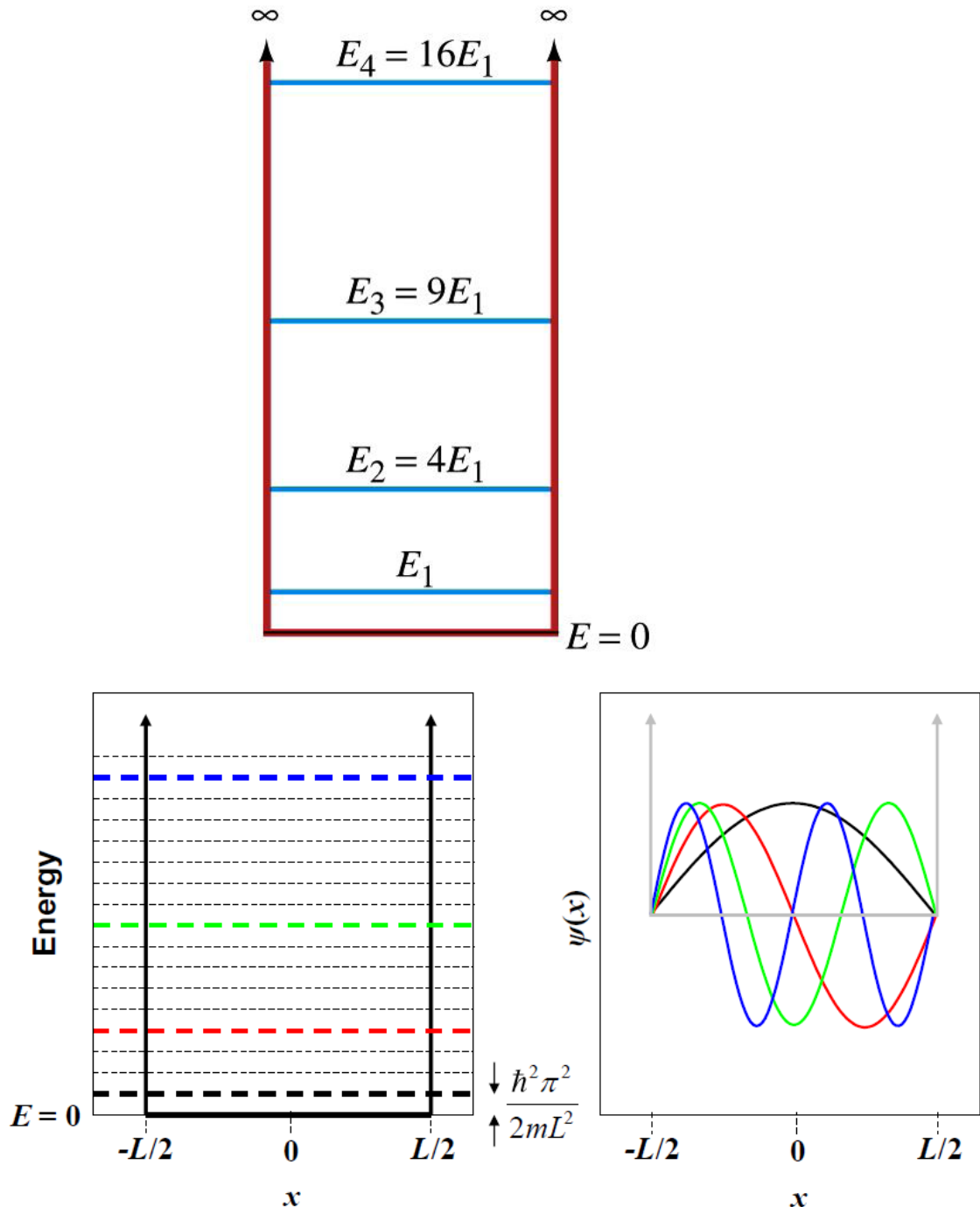


Рисунок 3- Потенційна яма та розподіл хвильових функцій

З прийнятною точністю систему можна моделювати як нескінченно глибокої потенційної ями. Енергія пов'язаних станів усередині такої структури має вигляд

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2 = E_L n^2 \quad (1)$$

де введено позначення

$$E_L = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} \quad (2)$$

Переходи між рівнями призводять до зміни енергії

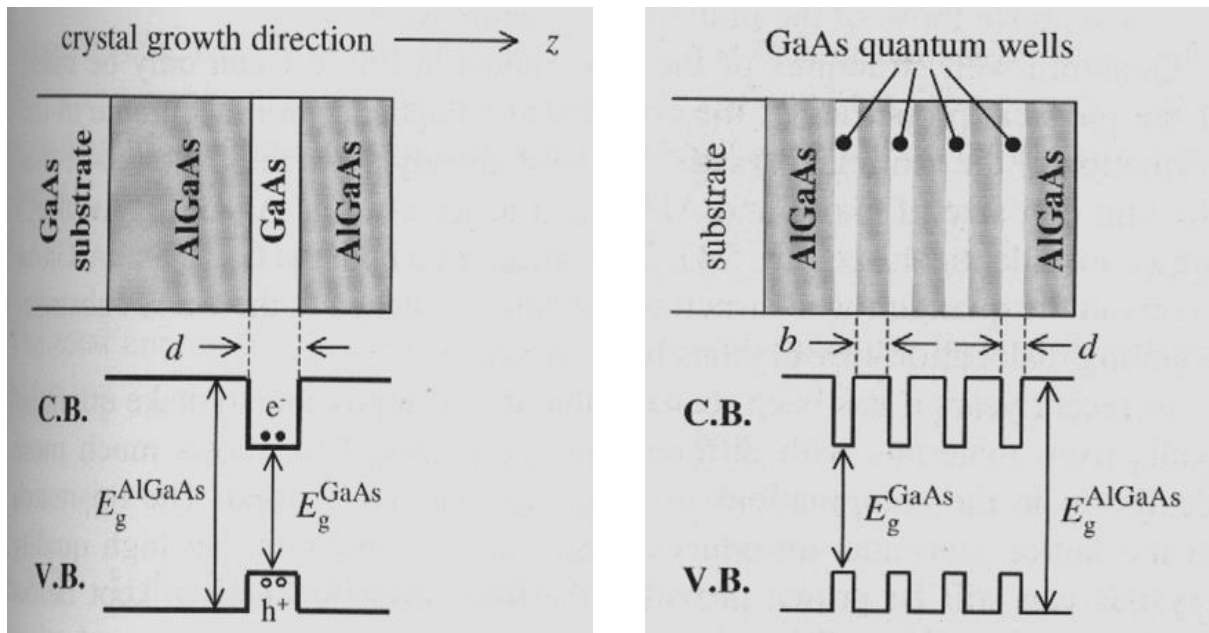
$$\Delta E_{n+1,n} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} ((n+1)^2 - n^2) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} (2n+1) \quad (3)$$

У деяких умовах відбувається випромінювання фотона із частотою

$$\Delta E_{n+1,n} / h = \nu$$

Здійснюючи переходи між рівнями, можна досягти випромінювання з потрібною нам частотою, причому потужність такого генератора визначається кількістю квантових точок на одиниці площі, що призводить до значної енергії генерації.

З іншого боку, можливе формування таких квантових ям шляхом послідовного наплення напівпровідників з різними ширинами заборонених зон, як показано на рисунку. Природно, у разі виникає потенційна квантова яма з кінцевої глибиною, енергетичні рівні якої не описуються такою простою формулою як (1). Мало того, невідомо заздалегідь, скільки рівнів поміститься у потенційну яму.



Якщо отримання рівнів енергії у нескінченно глибокої потенційної ямі необхідна єдина концепція - уявлення про хвильової природі електрона, то для потенційної ями з кінцевої глибиною необхідно вирішити рівняння Шредингера разом із граничними умовами, які, своєю чергою, визначаються геометрією завдання.

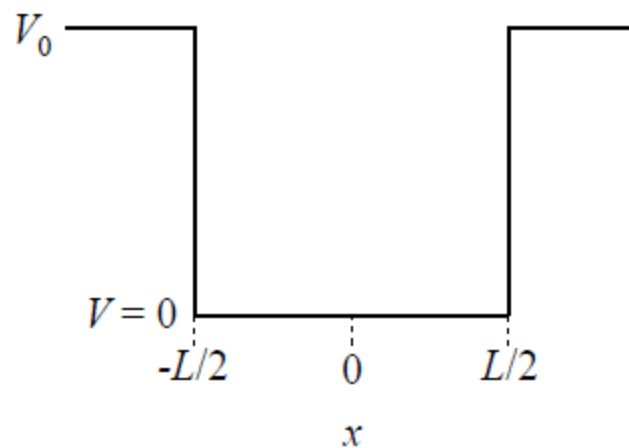


Рисунок 4- Потенційної ями з кінцевої глибиною

Рівняння Шредингера для заданого потенціалу:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V(x) \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (5)$$

де $V(x)$ потенціал (рис.4)

Рівняння Шредінгера для кожної області виглядають так:

$$\text{область I: } x < -\frac{L}{2} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_I(x)}{dx^2} + V_0\Psi_I(x) = E\Psi_I(x) \quad (6)$$

$$\text{область II: } \frac{L}{2} \leq x \leq -\frac{L}{2} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{II}(x)}{dx^2} + 0 \cdot \Psi_{II}(x) = E\Psi_{II}(x) \quad (7)$$

$$\text{область III: } x > \frac{L}{2} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi_{III}(x)}{dx^2} + \infty \cdot \Psi_{III}(x) = E\Psi_{III}(x) \quad (8)$$

Той факт, що результуюча хвильова функція має бути безперервною у всьому просторі, означає, що її шматки $\Psi_I(x)$, $\Psi_{II}(x)$, $\Psi_{III}(x)$ безперервні кожен у своїй області і, крім того, у прикордонних точках, де стикуються області, значення відповідних шматків хвильової функції ліворуч і праворуч мають збігатися. Тому граничними умовами у точках $x = -\frac{L}{2}$ та

$x = \frac{L}{2}$ є наступні співвідношення:

$$\begin{aligned} \Psi_I\left(-\frac{L}{2}\right) &= \Psi_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \\ \Psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \end{aligned} \quad (9)$$

Оскільки це рівняння другого порядку, то поряд з безперервністю хвильових функцій ми повинні врахувати умову безперервності перших похідних.

$$\begin{aligned}\Psi'_I\left(-\frac{L}{2}\right) &= \Psi'_{II}\left(-\frac{L}{2}\right) \\ \Psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right).\end{aligned}\tag{10}$$

Рішення у трьох областях подається у вигляді:

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ce^{\alpha x}, & x < -\frac{L}{2} \\ A\sin(kx) + B\cos(kx), & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ De^{-\alpha x}, & x > \frac{L}{2} \end{cases}, \tag{11}$$

Де

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, \tag{12}$$

$$\text{та } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{13}$$

До рішення (11) входять чотири константи, які повністю визначаються чотирма граничними умовами, але лише за умови, що штучно обмежуємо нашу увагу на симетричному $A = 0$ чи антисиметричному $B = 0$ випадку всередині потенційної ями. Якщо подивитися на рис. 3 (права частина) можна бачити як симетричні (червоний і зелений), так і антисиметричні хвильові функції. Обмежимо свою увагу на симетричній частині, хоча для повної картини потрібне вивчення всього спектру.

Отже, симетричне рішення виглядає так:

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{\alpha x}, & x < -\frac{L}{2} \\ B\cos(kx), & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ e^{-\alpha x}, & x > \frac{L}{2} \end{cases} \tag{14}$$

Природно, через симетричність $C = D = 1$. Те, що ці константи (для простоти) рівні одиниці - неправильно, проте, на значення енергії це припущення не впливає. Насправді ці постійні визначаються за умови нормування. Далі використовуємо умову безперервності хвильової функції та її першої похідної (9-10).

$$\begin{aligned} \Psi_{II}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Psi_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \\ B \cos\left(k\frac{L}{2}\right) &= e^{-\alpha\left(\frac{L}{2}\right)} \end{aligned} \quad (15)$$

та

$$\begin{aligned} \Psi'_{II}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Psi'_{III}\left(\frac{L}{2}\right) \\ -Bk \sin\left(k\frac{L}{2}\right) &= -\alpha e^{-\alpha\left(\frac{L}{2}\right)} \end{aligned} \quad (16)$$

Тепер розділимо (16) на (15).

$$\frac{Bk \sin\left(k\frac{L}{2}\right)}{B \cos\left(k\frac{L}{2}\right)} = \frac{\alpha e^{-\alpha\left(\frac{L}{2}\right)}}{e^{-\alpha\left(\frac{L}{2}\right)}} \quad (17)$$

$$\tan\left(k\frac{L}{2}\right) = \frac{\alpha}{k}$$

Пригадаємо, що ,

$$E_L = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2},$$

тоді

$$k \frac{L}{2} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \frac{L}{2} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{2mEL^2}{\hbar^2 \pi^2}} = \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{E}{E_L}}$$

та

$$\frac{\alpha}{k} = k = \frac{\sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} = \sqrt{\frac{V_0}{E} - 1} = \sqrt{\frac{(V_0/E_L)}{(E/E_L)} - 1} = \sqrt{\frac{a}{z} - 1},$$

де ми ввели позначення:

$$a = \frac{V_0}{E_L} \quad \text{і} \quad z = \frac{E}{E_L}$$

Таким чином, енергія визначається із рішення рівняння:

$$\tan\left(\frac{\pi}{2} \sqrt{z}\right) = \sqrt{\frac{a}{z} - 1} . \quad (18)$$

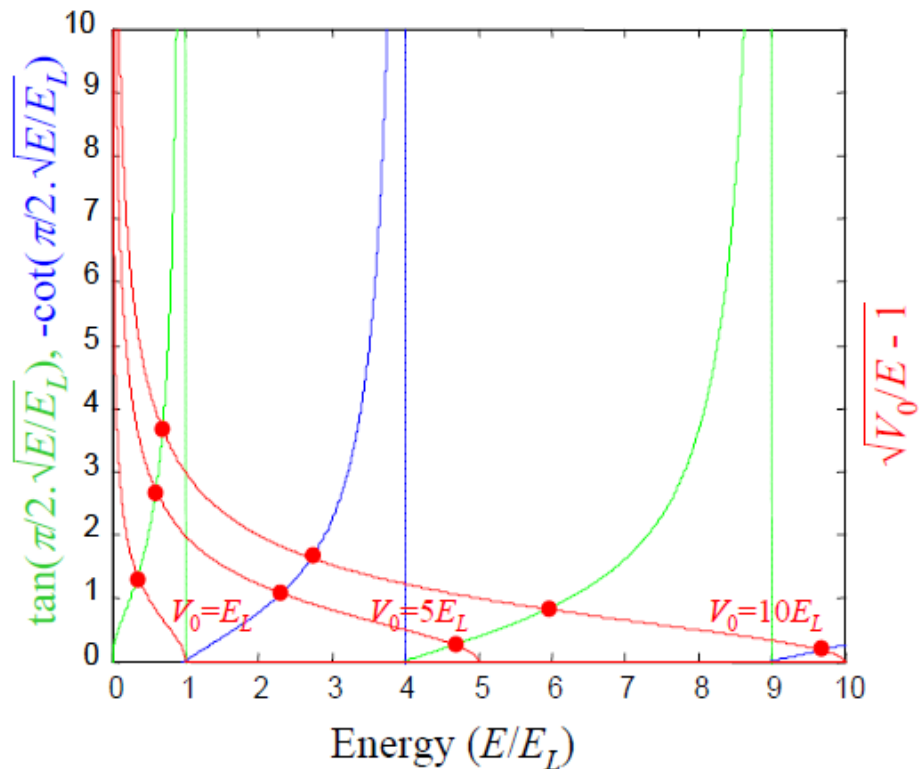


Рисунок 5-Рішення для симетричної та антисиметричної хвильової функції

На рисунку 5 зображені рішення (червоні точки) як для симетричного (перетин зелених з червоними лініями), так і для антисиметричного рішення. Зазначимо, червоні лінії – права частина (18) при різних параметрах $a = \frac{V_0}{E_L} = 1, 5, 10$, а зелені-ліва частина (18).

Порядок виконання роботи

1. Переглянути відео «Як працює електронний мікроскоп?».

<https://www.youtube.com/watch?v=YukL0bLh088>

2. Провести розрахунок

Константи:

Швидкість світла $c = 2.997924580 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

Постійна Планка $h = 6.6260755 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 4.136 \cdot 10^{-34} \text{ eV} \cdot \text{s}$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

Власна енергія. $mc^2 = 0.511 \text{ MeV} \cdot \text{s} = 0.511 \cdot 10^6 \text{ eV} \cdot \text{s}$

3. Кожен студент отримує значення a : від $a = 4.25$ до $a = 9$ з кроком 0.25 (тобто другий студент має 4.5 і т.інш.).

4. У всіх глибина квантової ями $V_0 = 1 \text{ eV}$. За заданим значенням a

знаходимо $E_L = a \cdot 1 \text{ eV}$ і, використовуючи $E_L = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2}$ і глибину потенційної ями, обчислюємо L .

5. Знаходимо рівні енергії, вирішуємо рівняння (18). На одному аркуші

будуємо графіки двох функцій $\tan\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{z}\right)$ та $\sqrt{\frac{a}{z}-1}$. Потім визначаємо

точки перетину цих двох графіків z_1 та z_2 . Далі знаходимо значення рівнів енергії $E_1 = z_1 E_L$ та $E_2 = z_2 E_L$.

6. Визначаємо частоту та довжину хвилі світла на цьому переході
 $h\nu = E_2 - E_1$.

В оформленні докладно наводимо всі обчислення та графічне рішення у вигляді файлу чи роздруківки.

7. Підводимо підсумки та оформлюємо звіт.

Контрольні питання

1. Поясніть роботу електронного мікроскопу
2. Що таке «квантові точки»?
3. Застосування колоїдних квантових точок