Оптические свойства квантовых точек из PbS

Авдеев И.Д.¹, Нестоклон М.О.¹, Гупалов С.В.^{1,2}

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26

²Department of Physics, Jackson State University, Jackson Mississippi, 39217, USA

DOI 10.34077/Semicond2019-265

Квантовые точки из сульфида свинца перспективны для применений в фотовольтаике [1], а также в устройствах оптоэлектроники ИК диапазона [2]. Узкая ширина запрещенной зоны и легкие массы носителей позволяет эффективно управлять их оптическими свойствами за счет размерного квантования. Несмотря на то, что в настоящее время возможно экспериментальное исследование одиночных квантовых точек из PbS, влияние многодолинной зонной структуры на их оптические свойства до сих пор изучено не до конца.

Сульфид свинца — прямозонный полупроводник, обладающей сложной зонной структурой. Экстремумы зон (валентной и проводимости) расположены в четырех неэквивалентных L долинах [3]. В результате, с учетом спина, основное состояние экситона должно быть 64-хратно вырождено. В реальных наноструктурах столь высокой кратности вырождения быть не может. Основными факторами, приводящими к расщеплению экситонных состояний в квантовых точках из PbS, являются междолинное рассеяние на поверхности точек и обменное кулоновское взаимодействие электрона и дырки.

В данной работе мы исследуем влияние тонкой структуры экситонных уровней на оптические свойства ограниченных нанокристаллов из PbS. Для расчетов мы используем эмпирический метод сильной связи [4], который позволяет точно учесть эффекты долинного смешивания. Обменный вклад рассчитывается в рамках конфигурационного взаимодействия [5] на одночастичных собственных состояниях электронов и дырок в квантовой точке.

Рис. 1. – Квантовая точка из PbS и ее спектр поглощения с учетом обмена и без него.

На Рис. 1 показана ограниченная квантовая точка из PbS диаметром около 4 нм (слева) и сечение поглощения (справа) рассчитанное для такой точки с учетом тонкой структуры экситонных уровней. Сплошной линией показан спектр без учета обменного взаимодействия, штрихованой линией показан режим, в котором обменное расщепление доминирует. Дополнительно для этого случая красными вертикальными линиями показаны энергии всех 64-х основных экситонных уровней. Расчет показывает, что долинное смешивание приводит к оптической активности исходно темных экситонных состояний. Абсолютные величины долинного расщепления и константы дальнего действия обмена зависят от радиуса квантовой точки R как $1/R^2$ и $1/R$ соответственно, что согласуется с расчетом в рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ теории возмущений.

[1] M. Wu, et al., *Nat. Photonics* **10**, 31 (2015),

[2] X. Gong, et al., *Nat. Photonics* **10**, 253 (2016),

[3] I. Kang, F.W. Wise, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 1632 (1997),

[4] A. N. Poddubny et. al., *Phys. Rev. B* **86**, 035324 (2012),

[5] J. B. Foresman, et. al., *The Journal of Physical Chemistry* **96**, 135 (1992).