

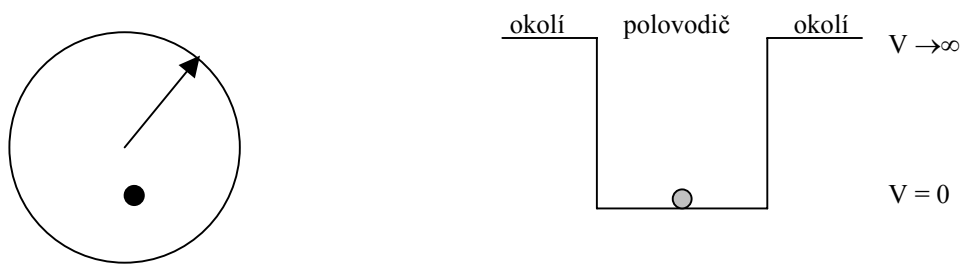
# Optické vlastnosti polovodičových nanokrystalů

Klasický polovodič je složen z atomů, které tvoří pravidelnou, uspořádanou strukturu. Důsledkem je energetická pásová struktura. Začneme-li zmenšovat velikost krystalu a přiblížíme se velikosti Bohrova poloměru excitonu (jednotky nanometrů) začnou se jeho fyzikální vlastnosti výrazně měnit.

## Model částice v potenciálové kouli

Tento model je nejjednodušším kvantově-mechanickým popisem nanokrystalů (kvantových bodů). Vychází z představy, že kvantový bod lze popsat nekonečně hlubokou potenciálovou jámou tvaru koule o poloměru  $R$ , ve které se volně pohybuje částice o hmotnosti  $\mu$  (viz obrázek 1). Tj. částice se může pohybovat jen uvnitř nanokrystalu polovodiče. Potenciál  $V(r)$  takové jámy vyjádříme následujícím vztahem

$$V(r) = 0 \quad (r \leq R), \quad V(r) = \infty \quad (r > R). \quad (1)$$



**Obr. 1.** Schématický obrázek potenciálové koule. Uvnitř oblasti o poloměru  $R$  se volně pohybuje částice o hmotnosti  $\mu$ .

Hamiltonián volně se pohybující částice je vyjádřen vztahem:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r). \quad (2)$$

Model představuje z kvantově mechanického hlediska pohyb volné částice v centrálním poli. Při řešení Schrödingerovy rovnice je nutno odlišit oblast uvnitř a vně potenciálové koule. Pro oblast uvnitř potenciálové koule ( $r \leq R$ ) je  $V(r) = 0$ . Řešením Schrödingerovy rovnice je následující vlnová funkce:

$$\Psi_{klm}(r) = k \sqrt{\frac{2}{\pi}} j_l(kr) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (3)$$

kde  $j_l$  je sférická Besselova funkce  $l$ -tého řádu,  $Y_{lm}$  je kulová funkce,  $k, l, m$  jsou kvantová čísla. Kvantová čísla  $l$  a  $m$  mohou nabývat následujících hodnot  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ ;  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ . Mezi kvantovým číslem  $k$  a energií částice  $E$  platí následující vztah:

$$E - V = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}. \quad (4)$$

Pro oblast vně potenciálové bariéry ( $r > R$ ) je řešením Schrödingerovy rovnice nulová vlnová funkce

$$\Psi_{klm}(r) = 0 \quad (5)$$

a to z důvodu nekonečnosti potenciálové bariéry. Na okraji kvantového bodu musí platit okrajová podmínka  $\Psi_{klm}(r)|_{r=R} = 0$ . Tento požadavek je možno splnit, jen jestliže je Besselova funkce rovna 0,

$$j_l(kr)|_{r=R} = 0. \quad (6)$$

Řešením rovnice (6) dostaneme povolené hodnoty kvantového čísla  $k$  a podle rovnice (4) energie  $E$ . Součin  $kr$  na hranici kvantového bodu musí splňovat následující podmínku

$$kr|_{r=R} = \chi_{nl}, \quad (7)$$

kde  $\chi_{nl}$  je  $n$ -tý kořen sférické Besselovy funkce  $l$ -tého řádu. Dosazením energie  $E$  z rovnice (2.4) do rovnice (7) dostaneme následující vzorec pro dovolené energie částice v nekonečně hluboké sféricky symetrické potenciálové jámě

$$E_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\chi_{nl}^2}{R^2}. \quad (8)$$

Nejnižší energetickou hladinu dostaneme, položíme-li kvantová čísla  $n, l = 0$ . Pro kořen Besselovy funkce pak platí  $\chi_{00} = \pi$ . Nejnižší energie částice v nekonečně hluboké sféricky symetrické potenciálové jámě je tedy následující

$$E_{0,0} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\pi^2}{R^2}. \quad (9)$$

## Model aproximace efektivní hmotností

Doposud jsme v rámci modelu částice v potenciálové kouli popisovali jen jedinou částici uzavřenou ve sféricky symetrické nekonečně hluboké potenciálové jámě. Tento model ale neodpovídá reálné situaci v polovodičích. Při dopadu fotonu s dostatečnou energií dojde v polovodiči k vygenerování elektron-děrového páru a volnému pohybu elektronu a díry.

V tomto odstavci popíšeme model aproximace efektivní hmotností. Tento model se liší od předchozího tím, že uvažuje dvě opačně nabitě částice: elektron a díru. Jinak je početní postup obdobný. V následujícím textu předpokládáme, že rozměr kvantového bodu je větší než mřížková konstanta. Efektivní hmotnosti elektronu a díry označíme  $m_e$  a  $m_h$ .

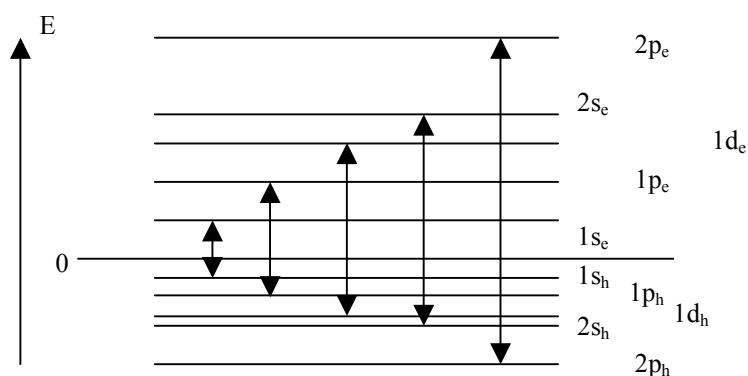
Jestliže zanedbáme Coulombovskou interakci působící mezi částicemi, je možné vlnovou funkci rozdělit na součin řešení pro elektron a pro díru. Je-li kvantový bod tvořen polovodičem se zakázaným pásem o šířce  $E_g$ , je možné přepsat rovnici (9) na tvar

$$E(R) = E_g + \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\pi^2}{R^2}, \quad (10)$$

kde  $\mu$  je redukovaná hmotnost elektronu a díry ( $\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$ ).

Vlivem prostorového kvantování dochází k přeměně pásů v diskrétní energetické hladiny, jak je vidět z rovnice (8). To je situace zcela odlišná od objemového polovodiče, jehož energetická struktura je tvořena pásy. Energetická struktura kvantových bodů se mnohem více blíží energetické struktuře atomu. Zároveň dochází k posunu základní energetické hladiny  $E_{0,0}$  (analogie šířky zakázaného pásu  $E_g$ ) směrem k vyšším energiím, jak je vidět z rovnice (10).

Na obrázku 2 jsou schematicky znázorněny energetické hladiny pro elektron a díru a dipólově dovolené optické přechody mezi těmito hladinami.



**Obr. 2** Energetický model kvantových bodů podle teorie efektivní hmotnosti s vyznačenými optickými dipólově dovolenými přechody.

## Měření lineární absorpce

Jako zdroj světla slouží lampa s halogenovou žárovkou (12V, 40W). Svazek je vycloněn clonou a fokusován na vzorek. Světlo je za vzorkem sbíráno čočkou a fokusováno na vstupní štěrbinu mřížkového spektrometru s diodovým polem InstaSpecII – Oriol (použitá mřížka 400 vrypů/mm, počet diod v poli 1024). Signál ze spektrometru je zpracován počítačem a je dostupný v datové i grafické formě. Instalovaný komerční software nám umožňuje měřit přímo absorpenci po sejmutí referenčního signálu a signálu šumu pozadí. Absorbance  $A$  je při zanedbání odrazů na rozhraních definována vztahem:

$$I_T = I_0 \exp(-\alpha d) = I_0 \exp(-A),$$

kde  $I_T$  je prošlá intenzita světla,  $I_0$  intenzita dopadající  $\alpha$  absorpční koeficient a  $d$  tloušťka vzorku.

S uvážením signálu pozadí  $I_{\text{back}}$

$$A = -\ln((I_T - I_{\text{back}})/(I_0 - I_{\text{back}})).$$

Na absorpčním spektru je dobře viditelné koleno vzniklé nehomogéním rozšířením prvního absorpčního maxima nanokrystalu, které odpovídá přechodu mezi základní elektronovou a děrovou hladinou. K přesnějšímu určení energie absorpčního maxima použijeme metodu druhé derivace absorpčního spektra. Tato metoda spočívá v provedení druhé derivace

absorpčního spektra podle vlnové délky a v nalezení příslušného lokálního minima druhé derivace. Před derivováním je však nutné spektra vyhladit.

---

**Úkoly:**

1. Postavte experimentální uspořádání pro měření absorpce
2. Zkalibrujte optický mnohakanálový analyzátor (OMA)
3. Změřte absorpční spektrum dvou vzorků nanokrystalů CdSe
4. Určete energetickou polohu základního přechodu
5. Vypočtete velikost nanokrystalů dle (10), přičemž šířka zakázaného pásu u CdSe  $E_g = 1.74$  eV a efektivní hmotnosti elektronu  $m_e = 0.12 m_0$ , díry  $m_h = 1.0 m_0$ .