

# Поглощение ИК излучения полярными оптическими фононами в массиве нанокристаллов CdS, состоящем из квантовых точек и квантовых нитей

*А. И. Белогорохов<sup>1)</sup>, И. А. Белогорохов<sup>+</sup>, М. И. Василевский\*, С. А. Гаврилов<sup>△</sup>, Р. П. Миранда<sup>\*2)</sup>, Х. Диттрих<sup>□2)</sup>,  
Д. Р. Хохлов<sup>+</sup>*

*ФГУП “Гиредмет”, 119017 Москва, Россия*

*+ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 119899 Москва, Россия*

*\* Centro de Física, Universidade do Minho, 4710-057 Braga, Portugal*

*△ Московский институт электронной техники (технический университет), 103198 Зеленоград, Московская обл., Россия*

*□ Технический университет Мюнхена, Физический факультет, E-16, D-85748 Гархинг, Германия*

Поступила в редакцию 7 июня 2006 г.

Результаты, полученные в ходе проведения исследований, позволили показать, что в случае, когда влияние эффектов размерного квантования на колебательные свойства нанокристаллов CdS несущественно, в спектрах поглощения нанокомпозитов, состоящих из квантовых нитей и квантовых точек CdS, наряду с пиком, обусловленным поперечными оптическими фононами, превалируют два четко выраженных основных пика, соответствующие вибрационным модам электростатического типа. В случае, когда размеры нанокристаллов настолько малы, что пренебречь влиянием эффектов размерного квантования не удается, структура спектральных зависимостей коэффициентов отражения и пропускания значительно усложняется, что обусловлено вкладом фононных мод смешанного продольно-поперечного типа.

PACS: 78.30.Fs, 78.67.-n

**1. Введение.** При исследовании процессов переноса носителей заряда в полупроводниковых nanoструктурах необходимо принимать во внимание влияние эффектов электрон-фононного взаимодействия. В свою очередь, для этого надо иметь информацию о поведении фононной подсистемы в исследуемых nanoструктурах. Особое место в данной проблематике занимает вопрос о влиянии пространственного и электростатического ограничения в нанокристаллах (NCs) различной формы на спектральное положение вибрационных мод различного типа (пространственно-ограниченные, смешанные продольно-поперечного типа, поверхностные и др.). Как правило, при проведении расчетов и экспериментальных исследований процессов поглощения электромагнитного излучения инфракрасного (ИК) диапазона длин волн полярными оптическими фононами в NCs ограничиваются случаем либо сферической [1–5], либо цилиндрической [6–8] геометрии. Вопрос о том, как изменится форма спектральной зависимости коэффициента поглощения, если массив NCs сформирован как из квантовых нитей (QWs), так и из

квантовых точек (QDs), рассмотрен лишь теоретически [9] в рамках модифицированной модели континуума.

**2. Теоретический расчет.** В данной работе представлены экспериментальные результаты, позволяющие понять, каким образом будет видоизменяться спектральная зависимость коэффициента поглощения света в массиве нанокристаллов, состоящем из QWs и QDs CdS по сравнению с nanoструктурами, сформированными только из QWs или только из QDs.

Компоненты поляризуемости квантовой нити могут быть представлены в виде [9]

$$\alpha_{\parallel} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_h}{\varepsilon_h} \frac{V}{4\pi} + \frac{\varepsilon_s \rho (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{4\pi \varepsilon_h} \sum_{\substack{m=0 \\ q \sim 0}} \frac{|A_n|^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega_n}, \quad (1)$$

$$\alpha_{\perp} = \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_h}{\varepsilon_s + \varepsilon_h} \frac{V}{2\pi} + \frac{\varepsilon_s \varepsilon_h \rho (\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{\pi (\varepsilon_s + \varepsilon_h)^2} \sum_{\substack{m=\pm 1 \\ q \sim 0}} \frac{|B_n^{(m)}|^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega_n}, \quad (2)$$

<sup>1)</sup>e-mail: belog@mig.phys.msu.ru

<sup>2)</sup>R. P. Miranda, Th. Dittrich.

где  $V$  и  $\rho$  – объем и плотность материала квантовой нити,  $\Gamma$  – параметр затухания фононных мод,  $q$ ,  $n$ ,  $m$  – соответствующие квантовые числа QWs. Значения  $A_n$  и  $B_n$  можно рассчитать, используя соотношения, приведенные в [3].

Для сферических квантовых точек будет справедливым следующее выражение для расчета их поляризуемости [3]:

$$\alpha = \frac{3\epsilon_s\epsilon_h(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)}{(\epsilon_s + 2\epsilon_h)^2} \sum_n \frac{D_n^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega_n}. \quad (3)$$

В свою очередь, расчет эффективной диэлектрической функции  $\epsilon^*$  композита, состоящего из QWs и QDs, синтезированных в диэлектрической матрице, можно провести в рамках модели Максвелла – Гарнетта с учетом дисперсии размеров NCs. Минимая часть  $\epsilon^*$  определяет поглощение света в объеме композита. Предполагая, что дисперсия размеров QWs и QDs подчиняется распределению Гаусса со средними  $\langle R \rangle_{QW}$ ,  $\langle R \rangle_{QD}$  и отклонениями  $\sigma_{QW}$ ,  $\sigma_{QD}$ , величину усредненной диэлектрической функции можно найти из соотношения

$$\frac{\epsilon^* - \epsilon_h}{\epsilon^* + 2\epsilon_h} = \frac{4\pi}{3} \left\{ f_{QW} \frac{\int F_{QW}(R) \bar{\alpha}^{QW} dR}{\int F_{QW}(R) V^{QW} dR} + f_{QD} \frac{\int F_{QD}(R) \bar{\alpha}^{QD} dR}{\int F_{QD}(R) V^{QD} dR} \right\}, \quad (4)$$

где  $F_i(R) = \exp[-(R - \langle R \rangle_i)^2 / 2\sigma_i^2] / \sqrt{2\pi}\sigma_i$ ,  $i = QW$ ,  $QD$ ,  $\bar{\alpha}^{QW} = (\alpha_{\parallel}^{QW} + 2\alpha_{\perp}^{QW})/3$ ,  $f_{QW}$  и  $f_{QD}$  – факторы заполнения для квантовых нитей и квантовых точек, соответственно.

**3. Экспериментальные результаты.** Исследованные образцы представляли собой массивы NCs, сформированные с помощью методов химического осаждения в матрицах пористого оксида алюминия (*por-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*). Диаметр пор варьировался в пределах от 5 до 25 нм, что позволило синтезировать в них нанокристаллы CdS разного размера и формы, а также изготавливать структуры, характеризующиеся различными факторами заполнения [10]. Изображения фрагментов двух наноструктур, полученные с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), представлены на рис.1 и 2. Они различаются между собой тем, что в первом случае диаметр пор в исходной матрице пористого Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> был меньше, чем во втором. Из приведенных рисунков можно видеть, что в порах оксида алюминия первого образца встречаются как отдельные нанокристаллы, форма которых близка к сферической, QDs, так и протяженные упорядоченные NCs CdS, которые можно рассматривать как квантовые нити.

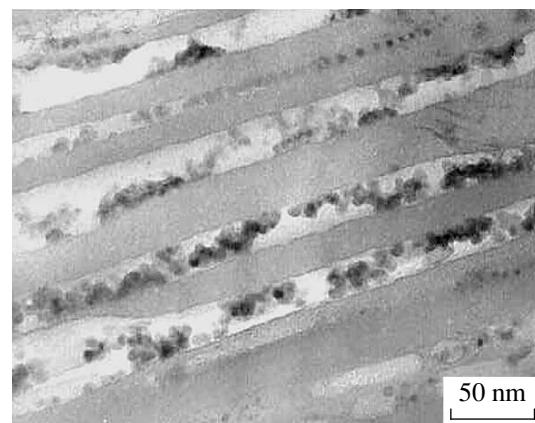


Рис.1. Изображение фрагмента матрицы пористого Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> с осажденными в поры нанокристаллами CdS, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии

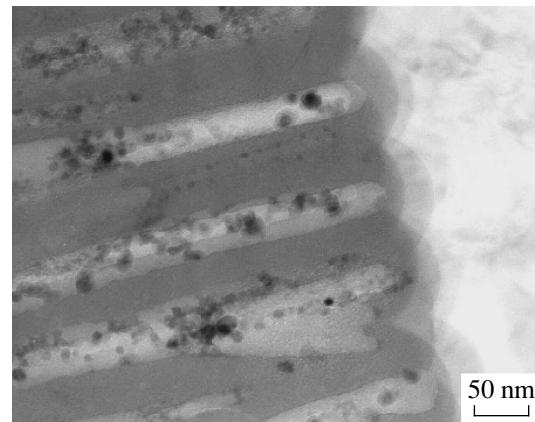


Рис.2. ПЭМ-изображение фрагмента второго образца, в котором средний диаметр пор исходной матрицы пористого Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> больше, чем в первом

Во втором образце массив NCs CdS сформирован, в основном, из QDs. На рис.3 представлены экспериментальные спектры поглощения этихnanoструктур. Можно видеть, что на спектральной зависимости I (образец, изображение которого представлено на рис.1) четко проявляются три основные пика поглощения. Первый из них располагается на частоте  $\omega'_F = \sqrt{(\epsilon_s\omega_{LO}^2 + \epsilon_h\omega_{TO}^2)/(\epsilon_s + \epsilon_h)}$ , соответствующей моде электростатического типа в QWs. Пик 2 обусловлен поглощением квантами света на моде Фрёлиха ( $\omega_F$ ) в сферических квантовых точках CdS. Для QWs и QDs CdS значения частот и  $\omega'_F$  и  $\omega_F$  составляют, соответственно, 290.7 и 281.2 см<sup>-1</sup>. Третий из них обязан своим появлением поперечным (TO) оптическим фононам в NCs. При уменьшении значений среднего радиуса  $\langle R \rangle$  NCs сила осцилляторов первых двух

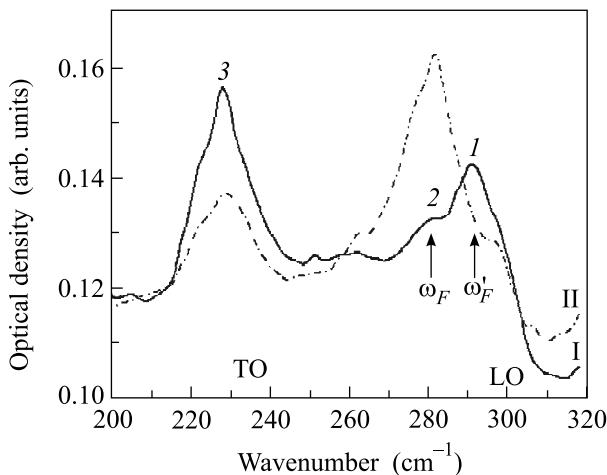


Рис.3. Спектральные зависимости оптической плотности исследуемых образцов в инфракрасном диапазоне длин волн. На рисунке отмечено положение продольных и поперечных оптических фононов в объемном CdS

вибрационных мод уменьшается, а при  $\langle R \rangle < 1.5$  нм форма спектральных зависимостей коэффициента поглощения существенно усложняется из-за увеличения вклада смешанных фононных мод в процесс поглощения электромагнитного излучения [9]. В проведенных экспериментах использовались матрицы пористого оксида алюминия, диэлектрическая проницаемость  $\epsilon$  которых намного меньше, чем  $\epsilon$  сульфида кадмия, формирующего массив нанокристаллов. По этой причине электростатические моды  $\omega'_F$  и  $\omega_F$  располагаются достаточно близко к продольному ( $LO$ ) оптическому фонону, формируя, при определенном соотношении сил осцилляторов, сложный рельеф спектральных зависимостей коэффициента отражения в области  $LO$  фонона CdS. Упорядочение в расположении квантовых точек сульфида кадмия вдоль пор матрицы *por-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* может быть причиной появления моды типа  $\omega'_F$  в оптических спектрах первого образца. В случае второго образца (кривая II рис.3) картина несколько проще. Вместо трех, в спектре доминируют два пика, которым в этом случае соответствуют мода Фрёлиха в QDs и поперечные оптические фононы QDs. На рис.4 представлены спектральные зависимости мнимой части эффективной диэлектрической проницаемости, рассчитанные согласно (4) для случая  $\langle R \rangle = 2.5$  нм,  $f_{QW} > f_{QD}$ , и для случая  $\langle R \rangle = 5$  нм,  $f_{QW} < f_{QD}$ . Первый из них должен соответствовать морфологии наноструктуры, фрагмент которой изображен на рис.1, второй – случаю, когда массив NCs состоит, в основном, из QDs, как это было реализовано в наноструктуре номер II.

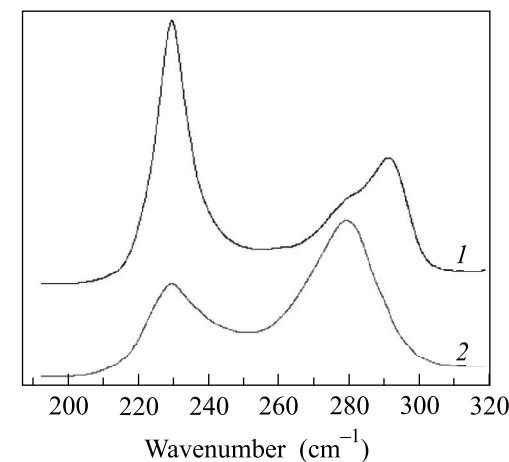


Рис.4. Спектральные зависимости мнимой части эффективной диэлектрической проницаемости композита *por-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/NCs-CdS*, рассчитанные для случая  $\langle R \rangle = 2.5$  нм,  $f_{QW} = 0.01$ ,  $f_{QD} = 0.04$  (1) и  $\langle R \rangle = 5$  нм,  $f_{QW} = 0.045$ ,  $f_{QD} = 0.005$  (2)

Можно видеть удовлетворительное совпадение данных, приведенных на рис.3 и рис.4.

**Заключение.** Таким образом, действительно, в экспериментальных оптических спектрах реализуется ситуация, которая теоретически прогнозируется из соотношений (1)–(4) для случая  $\langle R \rangle \geq 1.5$  нм, то есть если массив нанокристаллов сульфида кадмия сформирован из QWs и QDs, то в его спектре поглощения наряду с пиком, обусловленным поперечными оптическими фононами, аддитивно, с поправкой на фактор заполнения, доминируют две вибрационные электростатические моды, одна из которых, мода Фрёлиха, обязана своим появлением QDs, другая, которую можно рассматривать как двумерный аналог  $\omega_F$  – QWs. Полученные результаты позволяют объяснить наблюдавшуюся ранее [11] необычную форму спектральных зависимостей коэффициента отражения массивов NCs CdS, сформированных в матрице пористого оксида алюминия.

Работа выполнена в рамках проекта Российского фонда фундаментальных исследований № 06-02-16555.

1. M. I. Vasilevskiy, A. G. Rolo, M. V. Artemyev et al., Phys. Stat. Sol. (b) **224**, 599 (2001).
2. K. R. Patton and M. R. Geller, Phys. Rev. B **67**, 155418-1 (2003).
3. M. I. Vasilevskiy, Phys. Rev. B **66**, 195326 (2002).
4. Y. N. Hwang, S. H. Park, and D. Kim, Phys. Rev. B **59**, 7285 (1999).

5. F. Comas, C. Trallero-Giner, N. Studart, and G. E. Marques, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 6469 (2002).
6. R. Enderlein, *Phys. Rev. B* **47**, 2162 (1993).
7. B. H. Bairamov, A. Aydinli, B. Tanatar, and S. Gurrevich, *Mat. 1 Intern. Conf. on Materials for Microelectronics*, Barcelona, Spain, 1994.
8. D.-W. Wang, A. J. Millis, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **70**, 165101 (2004).
9. A. I. Belogorokhov, L. I. Belogorokhova, R. P. Miranda et al., *Phys. Stat. Sol. (c)* **1**, 2638 (2004).
10. S. A. Gavrilov, S. Yu. Tikhonova, E. A. Zhukov et al., *Proc. 25-th Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors*, Eds. N. Miura and T. Ando, 2000, p. 1745.
11. A. I. Belogorokhov, S. A. Gavrilov, and L. I. Belogorokhova, *Phys. Stat. Sol. (a)* **197**, 204 (2004).