

ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ НА ФОРМУ КРАЮ ПОГЛИНАННЯ КВАНТОВИХ ТОЧОК CdS_xSe_{1-x}

Малиш М.І., кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, Київ, Україна

Куліш М.Р., доктор фізико-математичних наук, Інститут фізики напівпровідників імені В.С. Лашкарева, НАН України, Київ, Україна

EFFECT TEMPERATURE ON FORM EDGE ABSORPTION CdS_xSe_{1-x} QUANTUM DOTS

Malysh M.I., candidate of physical-mathematical sciences, National Transport University, Kyiv, Ukraine

Kulish N.R., doctor of physical-mathematical sciences V. Lashkaryov, Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРИ НА ФОРМУ КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdS_xSe_{1-x}

Мальш Н.И., кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, Киев, Украина

Кулиш Н.Р., доктор физико-математических наук, Институт физики полупроводников имени В.Е. Лашкарева, НАН Украины, Киев, Украина

У більшості монокристалічних напівпровідників зменшення ширини забороненої зони (E_g) зі зростанням температури обумовлено: а) взаємним відштовхуванням рівнів в зонах дозволених енергій при збільшенні електрон-фононної взаємодії (доданки Фена 2-го порядку в теорії збурень); б) тепловим розширенням решітки (ангармонізмом коливань) і відповідною залежністю ширини забороненої зони від сталої решітки; в) згладжуванням періодичного потенціалу, що описується фактором Дебая-Уоллера; г) взаємодією міжзонних станів (доданки Фена для міжзонного зв'язку) [1-4]. Залежність $E_g(T)$ монокристалічних напівпровідників детально досліджена. Встановлено, що найбільший внесок у зміну E_g вносять перші два механізми.

Дані про вплив температури на енергетичну щільність E_g напівпровідникових квантових точок розрізнені, а про її зміну з температурою практично відсутні. Так, для опису $E_g(T)$ самоорганізованих квантових точок $InAs$ в роботі [5] використовувалася емпірична формула Варшні [6], а точок $InAs/GaAs$ – подібна формула [7]. Величина E_g квантових точок CdS_xSe_{1-x} , синтезованих у боросилікатному склі встановлена лише за кількох фіксованих температур: 4,2, 77 і 300 К [8]. В той же час температурні дослідження несуть інформацію про процеси електрон-фононної взаємодії, які в квантових точках мають свої особливості через малі розміри і, отже, через малу кількість атомів в квантовій точці, про вплив меж поділу (квантова точка-скло), механічної напруги і т.д.

Метою роботи є дослідження особливостей температурної залежності оптичної енергетичної щільності квантових точок CdS_xSe_{1-x} , з $\bar{r} > a_B$ (\bar{r} – середній радіус точок, a_B – радіус боровської орбіти екситона в масивному кристалі), близьких за властивостями до масивних кристалів, і точок з $\bar{r} < a_B$, в яких мають місце квантово-розмірні ефекти.

Параметри CdS_xSe_{1-x} , квантових точок і монокристалів того ж компонентного складу наведені в таблиці. Ширина забороненої зони точок визначалася зі спектрів поглинання, які вимірювалися стандартним методом і оброблялися за методикою, що наведена в роботах [8,10]. Температура зразків контролювалася мідь-константановою і хромель-алюмелевою термопарами і впродовж часу вимірювань підтримувалася постійною з похибкою < 2 К. Для точок з $\bar{r} > a_B$ за величину E_g приймалося значення енергетичної щільності між дном зони провідності і стелею валентної зони (рис. 1а), а для точок з $\bar{r} < a_B$ - відстань між найнижчими дірковим і електронним квантово-розмірними рівнями E_{01}^h і E_{01}^e (рис. 1б). В спектрах поглинання цим енергетичним

щілинам відповідають: в першому випадку – точка перетину залежності коефіцієнта поглинання K ($\hbar\omega$) від $(\hbar\omega - E_g)^{1/2}$ з віссю абсцис, а в другому – перший квантово-розмірний максимум поглинання [11], якщо не враховувати поправку на асиметрію розподілу точок по розміру. Випадкова похибка визначення за спектрами поглинання не перевищувала 0.01 еВ. Оскільки в стеклах з квантовими точками існує розкид квантових точок за розміром, наведені в роботі залежності відповідають квантовим точкам середнього розміру.

Таблиця 1 – Параметри квантових точок і монокристалів CdS_xSe_{1-x}

Параметр	$CdS_{0,13}Se_{0,87}$		$CdS_{0,32}Se_{0,68}$	
	Квантові точки	Монокристал	Квантові точки	Монокристал
\bar{r} , нм	7,63	–	2,90	–
a_B , нм	–	5,09	–	4,48
$\partial E_g / \partial T$, 10^{-4} еВ/К	$-4,40 \pm 0,10$	$-4,64^*$	$-2,80 \pm 0,15$	$-4,73^*$
β , К	143	143	–	163
θ , К	–	240^* [9]	–	258^* [9]

Примітка * Дані одержані шляхом лінійної інтерполяції між параметрами CdS і $CdSe$.

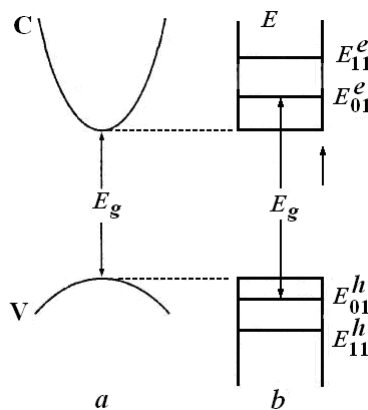


Рисунок 1 – Ширина: а – забороненої зони E_g прямозонного монокристала і б – відповідної енергетичної щілини квантової точки з $\bar{r} < a_B$

Експериментально одержана залежність $E_g(T)$ для скла КС-19 з квантовими точками CdS_xSe_{1-x} ($\bar{r} \approx 7.63$ нм) показана на рис. 2а (точки). Там же штриховою лінією наведена відповідна розрахована залежність для монокристалу. Для скла КС-19 при $\bar{r} > a_B$ (див. таблицю) енергетичний спектр точок подібний до спектра монокристалів, а залежність $E_g(T)$ описується формулою Варшні [6] у всьому діапазоні температур (рис. 2).

В (1) $E_0 = E_g$ при $T = 0$ К; α і β – константи, причому α зазвичай порівнюється з температурним коефіцієнтом зміни ширини забороненої зони $\partial E_g / \partial T$, а β – з температурою Дебая θ . З (1) видно, що при $T \ll \beta$ $\Delta E_g \propto T^2$, а при $T \gg \beta$ $\Delta E_g \propto T$. Ці особливості добре видно з рис. 2а: при низьких температурах залежність $E_g(T)$ нелінійна, а при високих – величина E_g лінійно зменшується з ростом T . На рис. 2б та ж залежність представлена у вигляді $E_g = f [T^2 / (T + \beta)]$, що дозволяє визначити коефіцієнт $\alpha \approx \partial E_g / \partial T$, та β із відносною похибкою $< 6\%$ і $< 10\%$ відповідно. Вони виявилися близькими до відповідних значень монокристалів того ж компонентного складу (див. таблицю і суцільну лінію на рис. 2а).

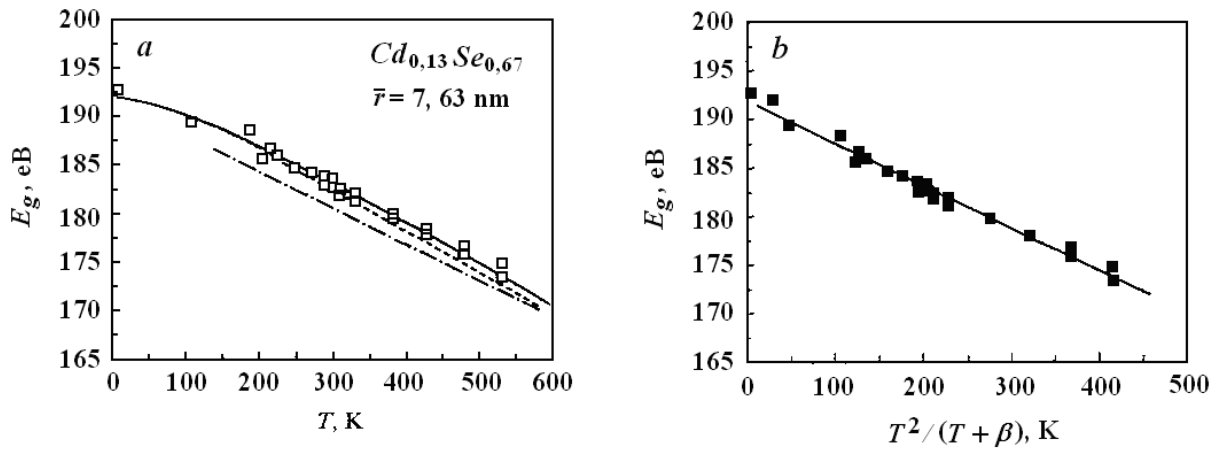


Рисунок 2 – Температурні залежності оптичної ширини забороненої зони квантових точок $CdS_{0,13}Se_{1-x}$ з $\bar{r} > a_B$. Точки (а, б) – експеримент, суцільні лінії (а, б) – розрахунок за формулою Варшні (1) при $\alpha = -4,40 \cdot 10^{-4} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$, $\beta = 143 \text{ K}$, штрихова лінія (а) – розрахунок за формулою (1) для монокристала, штрих-пунктирна (а) – та ж залежність після врахування гідростатичного тиску матриці скла

На рис. 3 наведені температурні залежності енергетичної щільності стекл, що містять точки $CdS_{0,32}Se_{0,68}$ з $\bar{r} < a_B$. Їх енергетичний спектр складається з набору дискретних рівнів, а енергія розмірного квантування $\approx 0.25 \text{ eV}$ [11]. Залежність $E_g(T)$ в цьому випадку лінійна у всьому інтервалі температур і не описується формулою (1) в діапазоні 4.2-100 К (рис. 3б). При цьому коефіцієнт $\lambda \approx \partial E_g / \partial T$ значно менший, ніж в монокристалі чи склі з точками $\bar{r} > a_B$ (див. таблицю). Це також добре видно з рис. 3а, де штриховою лінією показана відповідна залежність $E_g(T)$, розрахована для монокристала за формулою (1).

$$E_g = E_0 - \alpha T^2 (T + \beta)^{-1} \quad (1)$$

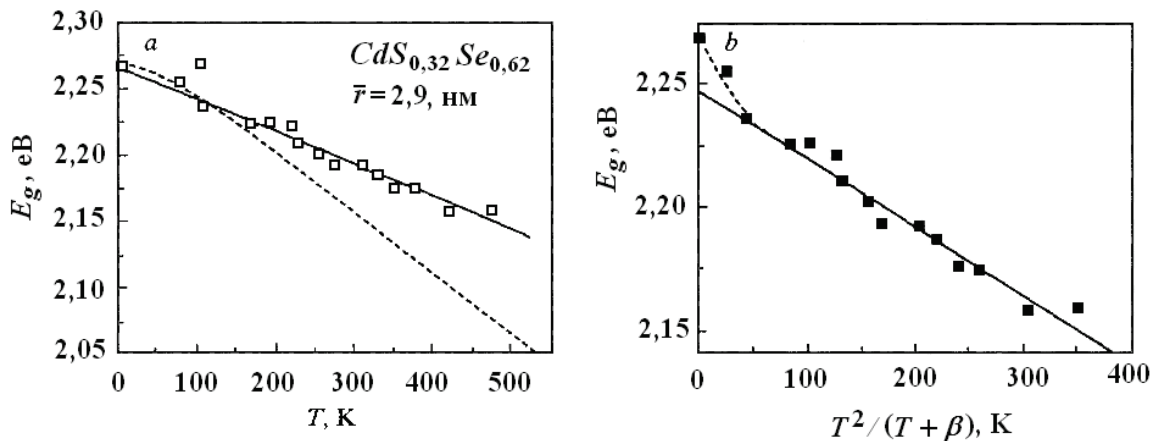


Рис. 3. Температурні залежності оптичної ширини забороненої зони квантових точок $CdS_{0,32}Se_{0,68}$ з $\bar{r} < a_B$. Точки (а, б) – експеримент, суцільна лінія на рис. а – усереднені за методом найменших квадратів експериментальні дані, штрихова лінія на рис. а – розрахунок за формулою (1) для монокристала, суцільна лінія на рис. б – розрахунок за формулою (1) для квантових точок.

Для полярних напівпровідників CdS і $CdSe$ основними механізмами зменшення E_g зі збільшенням T вважається фононна взаємодія і дисторсія кристалічної решітки. Разом з тим відомо [12], що температурна залежність термічного коефіцієнта об'ємного розширення $\gamma(T)$ цих кристалів

носить яскраво виражений характер. В інтервалі температур 4.2–200 К коефіцієнт γ від'ємний, а залежність $\gamma(T)$ має максимум. В той же час залежність $E_g(T)$ в цьому інтервалі температур монотонно змінюється, що свідчить про те, що дисторсія решітки мало впливає на зменшення E_g при зростанні температури. Згідно даних різних джерел доля ангармонізму коливань атомів в залежності E_g від температури складає від 1 до 25% [6].

На відміну від монокристалів в квантових точках потрібно враховувати вплив ангармонізму на величину енергії розмірного квантування, величина якої залежить від радіуса точки, і зміну ширини забороненої зони, обумовленої зміною тиску матриці [13]. Так, наприклад, для квантових точок $CdSe$ з $\bar{r} = 3.00$ нм збільшення температури від 200 до 300 К (в інтервалі, де коефіцієнт γ значний) викликає зростання радіуса квантової точки вздовж С-осі на 0.02%. Якщо врахувати залежність найнижчих енергетичних рівнів $E_{01}^e (E_{01}^h)$ від розміру, то це призведе до зменшення E_g приблизно на 0.0001 еВ. В дійсності, в зазначеному діапазоні температур $\Delta E_g \approx 0.03$ еВ, тобто відносний вклад дисторсії решітки становить 0.33%, що корелює з даними для монокристалів. Таким чином, можна вважати, що основний внесок в залежність $E_g(T)$ для квантових точок CdS_xSe_{1-x} в боросилікатній скляній матриці, як і у випадку монокристалів, вносить фононна взаємодія.

На рис. 2а штрих-пунктирною лінією показана залежність $E_g(T)$, розрахована з урахуванням гідростатичного стиснення точок матрицею скла [13]. Значення $\partial E_g / \partial T$ в цьому випадку виявляється дещо меншим ($-4.35 \cdot 10^{-4}$ еВ/К) у порівнянні зі значенням, отриманим без урахування тиску ($-4.40 \cdot 10^{-4}$ еВ / К), тобто відносний вклад цього ефекту складає $\sim 1.5\%$. Таким чином, як видно з рис. 2 і 3, при переході від точок з $\bar{r} > a_B$ до точок з $\bar{r} < a_B$ коефіцієнт $\partial E_g / \partial T$ зменшується, а залежність $E_g(T)$ стає лінійною в широкому діапазоні температур, в тому числі і при низьких температурах (4.2-100 К).

Зменшення коефіцієнта $\partial E_g / \partial T$ в принципі може бути викликано зменшенням величини електрон-фононної взаємодії. Однак, зі зменшенням радіуса точок до радіуса полярона в монокристалі константа електрон-фононної взаємодії зростає [14], що суперечить висловленому припущенню. Разом з тим очевидно, що зменшення об'єму точки зменшує повне число атомів (елементарних комірок або осциляторів), які беруть участь в коливаннях (фактор I), і веде до просторового обмеження періодичності пружних властивостей кристалічної решітки (фактор II).

При досить великих розмірах кристала граничні умови (фактор II) слабо впливають на коливальний спектр і можуть не враховуватися при аналізі процесів розсіювання. Такі умови легко реалізуються вже для макрокристалів з діаметром ~ 1 мкм, коливальний спектр яких ідентичний спектру масивних кристалів. У квантовій точці з $\bar{r} \approx a_B$ граничні умови відіграють значну роль. Якби поверхневі атоми протилежних граней точки у формі куба коливалися у фазі, то це було б еквівалентно виконанню циклічних граничних умов Борна-Кармана і впливу границі (розмірних ефектів) на коливальний спектр не було б. Однак навіть у цьому випадку він модифікувався б під впливом чинника I, тобто за рахунок зменшення числа елементарних осциляторів.

В реальній ситуації умова циклічності граничних умов порушується і хвильовий вектор фонона q обмежується з боку малих значень, тобто

$$\frac{2\pi}{d} = \frac{\pi}{r} \leq q \leq \frac{\pi}{a}, \quad (2)$$

де d – діаметр точки, a – стала решітки. З (2) видно, що для монокристала ($r \rightarrow \infty$) $q_{\min} \rightarrow 0$, тобто в ньому можуть генеруватися пружні хвилі великої довжини, які зазвичай описуються у континуальному наближенні, а $q_{\max} \rightarrow \pi / a$, тобто з боку коротких хвиль довжина хвилі фонона в твердому тілі обмежена сталою кристалічної решітки. Обмеження коливального спектра квантових точок з боку довгих хвиль ($q_{\min} > \pi / r$) є причиною того, що звукові хвилі з $\lambda \geq d$, для яких $q \rightarrow 0$, в них не збуджуються. Збудження такої хвилі було б еквівалентно простому зміщенню точок в просторі як цілого, так як для $\lambda \geq d$ зміщенням атомів, розташованих на відстані діаметра точки, можна знехтувати. Таким чином, просторове обмеження періодичності пружних властивостей кристалічної решітки квантової точки (фактор II) веде до обмеження коливального спектра з боку малих значень

хвильового вектора і пов'язаного з цим зменшення числа можливих коливальних станів в даній коливальній моді. Необхідно пам'ятати також, що кількість фононних станів кристала визначається числом елементарних комірок N і числом атомів S в одній комірці, тобто дорівнює $3SN$. В кристалах $A^{II}B^{VI}$ елементарна комірка містить дві молекули (4 атоми). Тому загальне число фононних станів дорівнює $12N$. При зменшенні радіуса точки від ~ 7.6 до ~ 3.0 нм її об'єм V (число елементарних комірок або осциляторів) зменшується на 94%, що веде до суттєвого зменшення щільності коливальних станів ($\sim V / 8\pi^3$).

Основним фононним механізмом розсіювання носіїв заряду в точках CdS_xSe_{1-x} є розсіяння на об'ємних поздовжніх оптичних (LO) модах [14-16], які легко рееструються в спектрах комбінаційного розсіювання світла 1-го порядку у вигляді досить інтенсивних піків [17]. Менш ефективними є процеси розсіювання на поверхневих оптичних модах, а також на об'ємних і поверхневих акустичних модах [16]. Значне зменшення числа елементарних осциляторів (електричних диполів в разі LO-мод, (фактор I) при переході до точок малих розмірів ($\bar{r} < a_B$) зменшує величину сумарної електричної поляризації решітки. У підсумку зменшується величина результуючого макроскопічного потенціалу $V_j(r)$, який є далекодіючим і входить в сумарний потенціал електрон-фононної взаємодії поряд з компонентами, що змінюються в масштабах постійної решітки. Останнє веде до зміни енергії носія заряду. Зменшення $V_j(r)$ по суті еквівалентно зменшенню поля Лоренца, пропорційного $P/3\epsilon_0$, де P – сумарна поляризація. Величина поля в конкретній точці r_0 визначається внеском від всіх інших осциляторів, обмежених об'ємом квантової точки. Водночас величина електричної поляризації решітки найбільша для станів з $q \rightarrow 0$, число яких також зменшується за рахунок ефектів просторового обмеження (фактор II).

Таким чином, можна припустити, що основною причиною зменшення коефіцієнта $\partial E_g / \partial T$ при переході до квантових точок малих розмірів є зменшення їх об'єму і пов'язане з цим зменшення числа елементарних комірок (осциляторів), а також зміни коливального спектра точок при просторовому обмеженні періодичності пружних властивостей їх кристалічної решітки. Обидва чинники зменшують результуючий макроскопічний потенціал, завдяки якому електрон взаємодіє з решіткою.

Лінійність залежності $E_g(T)$ для стекел, що містять точки малого розміру ($\bar{r} < a_B$), в рамках моделі, яка описується формулою Варшні, може пояснюватись зменшенням температури Дебая. Дійсно, якщо в (1) покласти $\beta = 0$, то обчислена залежність $E_g(T)$ стане лінійною. Припущення про можливість зменшення температури Дебая до нуля ($\theta \rightarrow 0$) висловлювалося ще в роботі [18], де теоретично досліджувалися випадки зниження мірності ланцюжкових і шаруватих кристалів. Було знайдено, що при зменшенні або відсутності взаємодії між шарами ймовірність розповсюдження пружних хвиль перпендикулярно шарам зменшувалася і наближалася до нуля. Однак, твердження про наближення θ до нуля може розглядатися в даному випадку лише як припущення, яке потребує подальшої експериментальної перевірки.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] H.Y. Fan. Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors Phys. Rev., 82, 900 (1951).
- [2] Ch. Keffer, T.M. Hayes, A. Bienenstock. PbTe Debye-Waller Factors and Band-Gap Temperature Dependence Phys. Rev. Lett., 21, 1676 (1968).
- [3] Ph. Allen, V. Heine. Theory of the temperature dependence of electronic band structures J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 9, 2305 (1976).
- [4] Б. Ридли. Квантовые процессы в полупроводниках (М., Мир, 1986).
- [5] L. Brusaferrri, S. Sanguinetti, E. Grilli, M. Guzzi, A. Bignazzi, F. Bogani, L. Carraresi, M. Colocci, A. Bosacchi, P. Frigeri, S. Franchi, Thermally activated carrier transfer and luminescence line shape in self-organized InAs quantum dots // Appl. Phys. Lett. 69(22) 3354-3356 (1996).
- [6] Y.P. Varshni. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors // Physica, 34, 149-154 (1967).
- [7] F. Adler, M. Geiger, A. Bauknecht, D. Haase, P. Ernst, A. Dornen, F. Scholz, H. Schweizer, Self-assembled InAs/GaAs quantum dots under resonant excitation // J. Appl. Phys., 83, 1631 (1998).
- [8] N.R. Kulish, V.P. Kunets, M.P. Lisitsa Determination of semiconductor quantum dots parameters by optical methods // Superlattices and Microstructures, 22, N3, P. 341-351 (1997).
- [9] Физико-химические свойства полупроводниковых веществ. Справочник под ред. С.А. Медведева (М., Наука, 1979) с. 48.

- [10] Н.Р. Кулиш, В.П. Кузнец, М.П. Лисица, Н.И. Малыш. Эволюция спектров поглощения при переходе от объемных к квантово-размерным кристаллам CdS_xSe_{1-x} // Укр. физ. журн., 37, 1141-1146 (1992).
- [11] V.P. Kunets. Model of optical transitions in A_2B_6 wurtzite type quantum dots // Semiconductor Physics, Quant. Electron. & Optoelectron., 4, 23-27 (1999).
- [12] В.С. Оскотский, И.Б. Кобяков, А.В. Солодухин. Температурная зависимость теплового расширения сульфида кадмия в интервале температур от 20 до 820 К // ФТТ, 22, 1478-1482 (1980).
- [13] Кузнец В.П. Вплив гідростатичного тиску скляної матриці на оптичні властивості нанокристалів $CdSSe$ // УФЖ.- 1998.- Т. 43, N1.- С. 64-69.
- [14] J.S. Marini, B. Stebe, E. Kartheuser. Exciton-phonon interaction in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres // Phys. Rev. B, 50, 14 302 (1994).
- [15] E. Roca, C. Trallero-Giner, M. Cardona. Polar optical vibrational modes in quantum dots // Phys. Rev. B, 49, 13 704 (1994).
- [16] Kasunori Oshiro, Koji Akai, Mitsuru Matsuura. Polaron in a spherical quantum dot embedded in a nonpolar matrix // Phys. Rev B, 58, 7986 (1998).
- [17] Kulish N.R., Kunets V.P., Lisitsa M.P., Mlayah A. and Valakh M.Ya. Size effects in TEM investigations, absorption and raman scattering spectra of CdSSe nanocrystals embedded into glass matrices // УФЖ.- 2000.- Т. 45, N2.-С. 164-167.
- [18] Тарасов В.В. Теория теплоемкости цепных и слоистых структур. // Журнал физической химии. 1950. Т. 24. С. 111-128.

REFERENCES

- [1] H.Y. Fan. Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors Phys. Rev., 82, 900 (1951).
- [2] Ch. Keffer, T.M. Hayes, A. Bienenstock. PbTe Debye-Waller Factors and Band-Gap Temperature Dependence Phys. Rev. Lett., 21, 1676 (1968).
- [3] Ph. Allen, V. Heine. Theory of the temperature dependence of electronic band structures J. Phys. C.: Sol. St. Phys., 9, 2305 (1976).
- [4] B. Ridly. Kvantovie prochesi v poluprovodnicah. Moskva, Mir. – 1986. (Rus).
- [5] L. Brusaferrri, S. Sanguinetti, E. Grilli, M. Guzzi, A. Bignazzi, F. Bogani, L. Carraresi, M. Colocci, A. Bosacchi, P. Frigeri, S. Franchi, Thermally activated carrier transfer and luminescence line shape in self-organized InAs quantum dots // Appl. Phys. Lett. 69(22) 3354-3356 (1996).
- [6] Y.P. Varshni. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors // Physica, 34, 149-154 (1967).
- [7] F. Adler, M. Geiger, A. Bauknecht, D. Haase, P. Ernst, A. Dornen, F. Scholz, H. Schweizer, Self-assembled InAs/GaAs quantum dots under resonant excitation // J. Appl. Phys., 83, 1631 (1998).
- [8] N.R. Kulish, V.P. Kunets, M.P. Lisitsa Determination of semiconductor quantum dots parameters by optical methods // Superlattices and Microstructures, 22, N3, P. 341-351 (1997).
- [9] Fiziko-himicheskie svoistva poluprovodnikovih veschestv. Spravochnik pod redakciei S.A. Medvedeva. Moskva. Nauka. – 1979. P. 48 (Rus).
- [10] N.R. Kulish, V.P. Kunets, M.P. Lisitsa, N.I. Malysh. Evolutsij spektrov pogloschenij pri perehode ot obiemnuh k kvantovo-razmernum kristalam CdS_xSe_{1-x} // Ukrainskii fizicheskii jurnal, 37, 1141-1146 (1992) (Rus).
- [11] V.P. Kunets. Model of optical transitions in A_2B_6 wurtzite type quantum dots // Semiconductor Physics, Quant. Electron. & Optoelectron., 4, 23-27 (1999).
- [12] V.S. Oskotskii, I.B. Kobkiakov, A.V. Soloduhin. Temperaturnaj zavisimost teplovogo rasshirenij sulfida kadmij v intervale temperatur ot 20 do 820 K // Fizika tverdogo tela, 22, 1478-1482 (1980) (Rus)..
- [13] V.P. Kunets. Vpliv gidrostatichnogo tisku sklianoi matritsi na optichni vlastivosti nanokristaliv CdSSe // Ukrainskii fizicheskii jurnal .- V. 43, N1.- С. 64-69 (Rus).
- [14] J.S. Marini, B. Stebe, E. Kartheuser. Exciton-phonon interaction in CdSe and CuCl polar semiconductor nanospheres // Phys. Rev. B, 50, 14 302 (1994).
- [15] E. Roca, C. Trallero-Giner, M. Cardona. Polar optical vibrational modes in quantum dots // Phys. Rev. B, 49, 13 704 (1994).
- [16] Kasunori Oshiro, Koji Akai, Mitsuru Matsuura. Polaron in a spherical quantum dot embedded in a nonpolar matrix // Phys. Rev B, 58, 7986 (1998).

[17] Kulish N.R., Kunets V.P., Lisitsa M.P., Mlayah A. and Valakh M.Ya. Size effects in TEM investigations, absorption and Raman scattering spectra of CdS_xSe_{1-x} nanocrystals embedded into glass matrices // УФЖ.- 2000.- Т. 45, N2.-С. 164-167.

[18] V.V. Tarasov. Teorij teploemkosti tsepnuh I sloistuh struktur. // Jurnal fizicheskoi himii. 1950. V. 24. P. 111-128 (Rus).

РЕФЕРАТ

Малиш М.І. Вплив температури на форму краю поглинання квантових точок CdS_xSe_{1-x} / М.І. Малиш, М.Р. Куліш // Вісник Національного транспортного університету. Серія «Технічні науки». Науково-технічний збірник. – К. : НТУ, 2015. – Вип. 1 (31).

В статті розглянуто особливості температурної залежності краю поглинання квантових точок CdS_xSe_{1-x}.

Об'єкт дослідження – нанокристали CdS_xSe_{1-x}.

Мета роботи – визначення температурної залежності оптичної ширини забороненої зони квантових точок CdS_xSe_{1-x}.

Метод дослідження – спектроскопія поглинання стекол легованих квантовими точками CdS_xSe_{1-x}.

В діапазоні 4.2-500 К досліджена температурна залежність оптичної енергетичної щільності $E_g(T)$ квантових точок CdS_xSe_{1-x}, синтезованих в боросилікатних скляних матрицях. Показано, що при $\bar{r} > a_B$ (\bar{r} - середній радіус точок, a_B – радіус боровської орбіти екситона в монокристалі) вона повторює залежність $E_g(T)$ монокристалів і описується формулою Варшні у всьому дослідженому діапазоні температур. При переході до точок з $\bar{r} < a_B$ спостерігається зменшення коефіцієнта температурної зміни ширини забороненої зони і відхилення від залежності Варшні в інтервалі температур 4.2-100 К. Ці особливості пояснюються зменшенням результуючого макроскопічного потенціалу електрон-фононного взаємодії і модифікацією коливального спектра точок при зменшенні їх об'єму.

Результати статті дають нові знання про параметри квантових точок і можуть використовуватися для прогнозування характеристик нанокристалів в області криогенних температур.

Прогнозні припущення щодо розвитку об'єкта дослідження – пошук шляхів створення нанорозмірних сенсорів.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОКРИСТАЛ, ШИРИНА ЗАБОРОНЕНОЇ ЗОНИ, ТЕМПЕРАТУРА, КРАЙ ПОГЛИНАННЯ.

ABSTRACT

Malysh M.I., Kulish N.R. Effect temperature on form absorption CdS_xSe_{1-x} quantum dots. Visnyk National Transport University. Series «Technical sciences». Scientific and Technical Collection. – Kyiv: National Transport University, 2015. – Issue 1 (31).

In the article was researched the evolution of the temperature dependence of the absorption edge of CdS_xSe_{1-x} quantum dots.

Object of study – the CdS_xSe_{1-x} nanocrystals.

Purpose – Determining the temperature dependence of the optical bandgap CdS_xSe_{1-x} quantum dots.

Research method – absorption spectroscopy of glasses doped CdS_xSe_{1-x} quantum dots.

The temperature dependence of the energy gap $E_g(T)$ in CdS_xSe_{1-x} quantum dots synthesized in a borosilicate glass matrix has been investigated in the range of 4.2—500 K. A dependence similar to that for bulk crystals is observed for dots with $\bar{r} > a_B$ (\bar{r} is an average radius of the dot and a_B is the Bohr exciton radius in the bulk), which is described by Varshni formula within the whole temperature range. Deviations from the Varshni dependence in the range 4.2—100 K and smaller band gap temperature coefficient was observed for dots with $\bar{r} < a_B$. Results are explained in terms of the decrease of the macroscopic electron-phonon potential and the modification of the vibration spectrum peculiar to the dot volume shrinkage.

KEY WORDS: NANOCRYSTALS, BAND GAP, TEMPERATURE, ABSORPTION EDGE.

РЕФЕРАТ

Малыш Н.И. Влияние температуры на форму края поглощения квантовых точек CdS_xSe_{1-x} / Н.И. Малыш, Н.Р. Кулиш // Вестник Национального транспортного университета. Серия «Технические науки». Научно-технический сборник. – К. : НТУ, 2015. – Вып. 1 (31).

В статье рассмотрены особенности температурной зависимости края поглощения CdS_xSe_{1-x} квантовых точек.

Объект исследования – нанокристаллы CdS_xSe_{1-x} .

Цель работы – определение температурной зависимости оптической ширины запрещенной зоны квантовых точек CdS_xSe_{1-x} .

Метод исследования – спектроскопия поглощения стекол легированных квантовыми точками CdS_xSe_{1-x} .

В диапазоне 4.2 – 500 К исследована температурная зависимость оптической энергетической щели $E_g(T)$ квантовых точек CdS_xSe_{1-x} , синтезированных в боросиликатной стеклянной матрице.

Показано, что при $\bar{r} > a_B$ (\bar{r} – средний радиус точек, a_B – радиус боровской орбиты экситона в монокристалле) она повторяет зависимость $E_g(T)$ монокристаллов и описывается формулой Варшни во всем исследованном диапазоне температур. При переходе к точкам с $\bar{r} < a_B$ наблюдается уменьшение коэффициента температурного изменения ширины запрещенной зоны и отклонение от зависимости Варшни в интервале температур 4.2—100 К. Наблюдаемые особенности объясняются уменьшением результирующего макроскопического потенциала электрон-фононного взаимодействия и модификацией колебательного спектра точек при уменьшении их объема.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: НАНОКРИСТАЛЛЫ, ШИРИНА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ, ТЕМПЕРАТУРА, КРАЙ ПОГЛОЩЕНИЯ.

АВТОРИ

Малиш М.І., кандидат фізико-математичних наук, Національний транспортний університет, доцент кафедри фізики, e-mail: M_Malysh@ukr.net, тел. 0508257165, Україна, 02090, м. Київ, вул. Новаторів 22 В, к. 351.

Кулиш М.Р., доктор фізико-математичних наук, Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарева, НАН України, Київ, Україна e-mail: n_kulish@yahoo.com, тел. +380951027563, Україна, 03028, м. Київ, вул. Велика Китаївська 10, к. 10.

AUTHORS

Malysh M.I. Candidate of physical-mathematical sciences, National Transport University, associate professor department of physic , e-mail: M_Malysh@ukr.net, tel. 0508257165, Ukraine, 02090, Kyiv, Novotoriv str. 22 B, of. 351.

Kulish N.R., doctor of physical-mathematical sciences V. Lashkaryov, Institute of Semiconductor Physics, NAS of Ukraine, e-mail: n_kulish@yahoo.com, tel. +380951027563, Ukraine, 03028, Kyiv, Velika Kitaevska str 10, of. 10.

АВТОРЫ

Малыш Н.И., кандидат физико-математических наук, Национальный транспортный университет, доцент кафедры физики, e-mail: M_Malysh@ukr.net, тел. 0508257165, Украина, 02090, г. Киев, ул. Новаторов 22 В, к. 351.

Кулиш Н.Р., доктор физико-математических наук, Институт физики полупроводников имени В.Е. Лашкарева, НАН Украины, Киев, Украина, e-mail: n_kulish@yahoo.com, тел. +380951027563, Украина, 03028, м. Киев, ул. Большая Китаевская 10, к. 10.

РЕЦЕНЗЕНТИ:

Данчук В.Д. доктор фізико-математичних наук, доцент, Національний транспортний університет, професор кафедри інформаційних і транспортних технологій, Київ, Україна.

Стрельчук В.В., доктор фізико-математичних наук, Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарева НАН України, Київ, Україна.

REVIEWERS:

Danchuk V.D., doctor of physical and mathematical sciences, National transport university, professor, department of information and truck technology, Kyiv, Ukraine.

Strelchuk V.V., doctor of physical-mathematical sciences V. Lashkaryov Institute of semiconductor physics, Kyiv, Ukraine.