

VILNIAUS UNIVERSITETAS

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRO  
PUSLAIDININKIŲ FIZIKOS INSTITUTAS

Ramūnas Nedzinskas

**EPITAKSINIŲ InGaAs KVANTINIŲ TAŠKŲ  
DARINIŲ  
MODULIUOTO ATSPINDŽIO IR  
FOTOLIUMINESCENCIJOS SPEKTROSKOPIJA**

Daktaro disertacijos santrauka

Fiziniai mokslai, fizika (02 P), puslaidininkų fizika (P 265)

Vilnius, 2012

Disertacija rengta 2007–2012 metais Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos institute.

**Mokslinis vadovas:**

prof. habil. dr. Gintaras Valušis (Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

**Konsultantas:**

dr. Vytautas Karpus (Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

**Disertacija ginama Vilniaus universiteto Fizikos mokslo krypties taryboje:**

**Pirmininkas:**

prof. habil. dr. Arūnas Krotkus (Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

**Nariai:**

prof. habil. dr. Eugenijus Šatkovskis (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

prof. habil. dr. Gintautas Tamulaitis (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

prof. habil. dr. Saulius Antanas Juršėnas (Vilniaus universitetas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

prof. habil. dr. Vidmantas Gulbinas (Fizinių ir technologijos mokslų centro Fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

**Oponentai:**

dr. Renata Butkutė (Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos institutas, technologijos mokslai, medžiagų inžinerija – 08 T, medžiagų technologija – T 150)

dr. Gediminas Trinkūnas (Fizinių ir technologijos mokslų centro Fizikos institutas, fiziniai mokslai, fizika – 02 P, puslaidininkių fizika – P 265)

Disertacija bus ginama viešame Fizikos mokslo krypties tarybos posėdyje 2012 m. rugsėjo mėn. 24 d. 15 val. Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos instituto posėdžių salėje, A. Goštauto 11, LT-01108 Vilnius, Lietuva.

Disertacijos santrauka išsiųsta 2012 m. rugpjūčio mėn. 23 d.

Disertaciją galima peržiūrėti Vilniaus universiteto bei Fizinių ir technologijos mokslų centro bibliotekose.

VILNIUS UNIVERSITY

SEMICONDUCTOR PHYSICS INSTITUTE OF  
CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY

**Ramūnas Nedzinskas**

**MODULATED REFLECTANCE AND  
PHOTOLUMINESCENCE SPECTROSCOPY OF  
EPITAXIAL InGaAs QUANTUM DOT  
STRUCTURES**

Summary of doctoral dissertation

Physical Sciences, Physics (02 P), Semiconductor Physics (P 265)

Vilnius, 2012

Doctoral dissertation was prepared during 2007–2012 in Semiconductor Physics Institute of Center for Physical Sciences and Technology, Vilnius, Lithuania.

**Scientific supervisor:**

Prof Dr Habil Gintaras Valušis (Center for Physical Sciences and Technology, Semiconductor Physics Institute, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

**Scientific adviser:**

Dr Vytautas Karpus (Center for Physical Sciences and Technology, Semiconductor Physics Institute, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

**Vilnius University Doctoral Dissertation Committee in Physics:**

**Chairman:**

Prof Dr Habil Arūnas Krotkus (Center for Physical Sciences and Technology, Semiconductor Physics Institute, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

**Members:**

Prof Dr Habil Eugenijus Šatkovskis (Vilnius Gediminas Technical University, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

Prof Dr Habil Gintautas Tamulaitis (Vilnius University, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

Prof Dr Habil Saulius Antanas Juršėnas (Vilnius University, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

Prof Dr Habil Vidmantas Gulbinas (Center for Physical Sciences and Technology, Institute of Physics, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

**Opponents:**

Dr Renata Butkutė (Center for Physical Sciences and Technology, Semiconductor Physics Institute, Technological Sciences, Materials Engineering – 08 T, Materials Technology – T 150)

Dr Gediminas Trinkūnas (Center for Physical Sciences and Technology, Institute of Physics, Physical Sciences, Physics – 02 P, Semiconductor Physics – P 265)

The official defence of dissertation will be held at 3 p.m. on September 24, 2012 at the Conference hall of Semiconductor Physics Institute (Center for Physical Sciences and Technology), A. Goštauto 11, LT-01108 Vilnius, Lithuania.

The summary of doctoral dissertation was distributed on August 23, 2012.

Dissertation is available for review at the libraries of Vilnius University and Center for Physical Sciences and Technology.

# Turinys

TEMOS AKTUALUMAS	6
Darbo tikslas	8
Tirti kvantinių taškų nanodariniai	8
Darbo uždaviniai	8
Mokslinis naujumas	9
Praktinė vertė	9
Ginamieji teiginiai	10
Disertacijos darbo rezultatų viešinimas	11
<b>Mokslinės publikacijos</b> . . . . .	<b>11</b>
<b>Tarptautinės konferencijos</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>Nacionalinės konferencijos</b> . . . . .	<b>13</b>
Studentų/doktorantų konferencijos . . . . .	13
<b>Kiti mokslo darbai, neįtraukti į disertaciją</b> . . . . .	<b>14</b>
Disertacijos sandara	14
DISERTACIJOS APRAŠYMAS	15
Įvadas	15
1 Puslaidininkiniai kvantiniai taškai — apžvalga	15
2 Bandiniai ir eksperimento metodika	15
3 Kvantinių taškų darinių optinės savybės	16
<b>3.1 InAs kvantinių taškų GaAs/AlAs supergardenėje energijos lygmenų spektras</b>	<b>16</b>
Kvantinių taškų optiniai ypatumai . . . . .	17
Drėkinančiojo sluoksnio optiniai ypatumai . . . . .	18
<b>3.2 InAs kvantinių taškų sudėtinėje InGaAs/GaAs/AlAs kvantinėje duobėje energijos spektras</b> . . . . .	<b>19</b>
In kiekis InGaAs sluoksnyje . . . . .	21
<b>3.3 InGaAs kvantinių strypelių InGaAs kvantinėje duobėje energijos spektras</b>	<b>22</b>
As <sub>2</sub> versus As <sub>4</sub> įtaka optinėms kvantinių strypelių savybėms . . . . .	22
<b>3.4 InGaAs kvantinių strypelių optinė anizotropija</b> . . . . .	<b>24</b>
Optinės poliarizacijos laipsnis . . . . .	26
4 Analitinis modelis cilindrinų kvantinių taškų energijos spektro skaičiavimams	28
Atrankos taisyklės . . . . .	29
Analitinių skaičiavimų rezultatai . . . . .	30
Pagrindiniai disertacijos rezultatai ir išvados	33
Pagrindinė literatūra	34
Summary	35
Apie autorių	36

## TEMOS AKTUALUMAS

Šiuolaikinė auginimo technologija, kaip antai, molekulinio pluoštelio epitaksija (*molecular beam epitaxy*, MBE), drauge su juostinės struktūros inžinerija leidžia kurti norimų optinių savybių optoelektronikos prietaisus, kurių aktyviąją sritį formuoja III–V grupės puslaidininkiniai nano-dimensijų dariniai — dvimatės (2-D) kvantinės duobės, 1-D gijos, 0-D taškai, strypeliai, žiedai [1, 2]. Saviformuojantys InAs kvantiniai taškai (*quantum dot*, QD), kurių charakteringos elektronų tarppajuostinių (*intrasubband*) šuolių energijos plyti vidutinių ir tolimųjų infraraudonųjų (IR) bangų spektriniame ruože (3–25  $\mu\text{m}$ ), sudaro šiuolaikinių IR fotojutiklių (*quantum dot infrared photodetector*, QDIP) aktyviąją terpę. Svarbu pažymėti, kad įprastuose IR fotojutikliuose, kurių veikimas pagrįstas optiniais šuoliais tarp kvantinių duobių (*quantum well*, QW) energijos lygmenų, statmenai krintančios spinduliuotės sugertis iš principo yra negalima. Tuo tarpu QD dariniuose statmenoji sugertis galima (tą numato kvantmechaninės atrankos taisyklės), nes krūvininkai erdvėje apriboti visomis trimis kryptimis. Vadinasi, 0-D kvantinių taškų energijos spektras panašus į diskretinį-atominį spektrą. Įdomu tai, kad keičiant QD aplinką (pvz., greta kvantinio taško įterpiant barjerinį AlAs arba įtempimus sumažinantį InGaAs sluoksnį) arba QD dydį bei formą (pvz., auginant kvantinius strypelius arba žiedus) galima paslankiai valdyti QD elektroninę sandarą.

Pastaraisiais metais buvo išvystytas naujas metodas, kuriuo galima formuoti norimą energijos lygmenų sandarą QD fotojutikliuose. Ši QDIP schema buvo praktiškai įgyvendinta įterpus auginimo kryptimi vertikaliai orientuotus InAs kvantinius taškus į GaAs/AlAs supergardelę (*superlattice*, SL) [3]. Tokiuose kombinuotuose QD-SL (*dot-in-a-superlattice*) dariniuose elektronų šuolių energijos tarp QD surištųjų būsenų ir SL minijuostų yra varijuojamos parenkant tam tikrą SL periodą arba keičiant QD auginimo sąlygas. Eksperimentiškai nustatyta, kad šie QD dariniai pasižymi palyginti didesne fotosrove bei keliomis eilėmis mažesne tamsine srove negu struktūros, kur QD yra įterpti į GaAs matricą (be GaAs/AlAs SL). Kita vertus, dėl saviformuojančių QD dydžio fliuktuacijų (Gausso pasiskirstymo), jų formos ir matmenų mažinimo ribotų galimybių, tokių nanodarinių auginimas iki šiol išlieka poblemiškas.

Siekiant efektyviai paslinkti InAs/GaAs QD struktūrų charakteringą bangos ilgį į raudonąją (ilgabangę) spektrinę sritį ir tokiu būdu pritaikyti QD darinius aktualioms šviesolaidinių telekomunikacijų (lazieriai, puslaidininkiniai optiniai stiprintuvai) ir naktinio matymo (jutikliai) prietaisų reikmėms, buvo pasiūlyta InAs kvantinius taškus padengti įtempimus sumažinančiu InGaAs sluoksniu [4]. Toks kvantinių taškų

kų sudėtinėje InGaAs/GaAs/AlAs duobėje (*dot-in-a-well*, DWELL) dizainas suteikia galimybę paslankiai valdyti nanodarinių optinį atsaką varijuojant QW parametrus ir/ar pridedant išorinį elektrinį lauką.

Iš fundamentaliųjų tyrimų perspektyvos, koloninių QD arba kvantinių strypelių (*quantum rod*, QR) dariniai yra jungiamoji grandis tarp 0-D kvantinių taškų ir 1-D kvantinių gijų dėl krūvininkų kvazi-vienmačio ribojimo. Iš praktinės pusės, QR dariniai yra aktualūs funkciniai elementai puslaidininkiniams optiniams stiprintuvams (*semiconductor optical amplifier*, SOA). Tuo tikslu buvo pasiūlyta kvantinių taškų formos ir sudėties inžinerija, pagrįsta trumpo periodo InAs/GaAs supergirdelės auginimu ant saviformuojančių InAs kvantinių taškų sluoksnio [5]. Remiantis šiuo metodu, kvantinių strypelių aukštis yra vienareikšmiškai apibrėžiamas supergirdelės periodų skaičiumi  $N$ , o medžiaginė strypelių sudėtis paslankiai valdoma parenkant As auginimo šaltinį ( $As_2$  arba  $As_4$ ). Tokiu būdu buvo užauginti palyginti aukštų kvantinių strypelių (aukštis-plotis santykis  $\gg 1$ ) heterodariniai, pasižymintys dideliu In kiekio  $In_xGa_{1-x}As$  kvantiniame strypelyje ir jį supančioje  $In_xGa_{1-x}As$  kvantinėje duobėje santykiu ( $x_{QR}/x_{QW} > 3$ ).

Reikšminga pažymėti, kad InGaAs QR darinių optinės savybės labai priklauso nuo šviesos poliarizacijos. Tik pastarųjų metų tyrimai, griežtai apibrėžę skersinės elektrinės (TE) elektromagnetinio lauko komponentės orientaciją, atskleidė, kad šiems dariniams būdinga didelė optinė anizotropija [6], kurios negalima paaiškinti vien QR formos asimetrija. Ši unikali kvantinių strypelių fizikinė aplinkybė nurodo, kad esant tam tikram strypelio aukščiui ir medžiaginei sudėčiai, galima pasiekti nuo šviesos poliarizacijos nepriklausantį optinį atsaką, o tai sudaro puikias prielaidas suprojektuoti SOA šviesolaidinėms telekomunikacijoms.

Puslaidininkinių kvantinių heterodarinių — funkcinių terahercinės fotonikos elementų ir optoelektronikos komponentų — optinis atsakas apima plačią spektrinę IR–UV sritį, todėl šių darinių energijos lygmenų spektras yra pamatas analizuoti jų funkcionalumą. Taip pat kvantinių darinių elektroninės sandaros tyrimai yra svarbūs jų elektroninių lygmenų inžinerijai (naujų juostinės struktūros dizainų kūrimui) ir auginimo technologijų vystymui. Tokių nanodarinių eksperimentiniam spektrui tirti net ir kambario temperatūroje gali būti sėkmingai taikoma jautri moduluoto atspindžio — fotoatspindžio (*photoreflectance*, PR) ir bekontakčio elektrinio atspindžio (*contactless electroreflectance*, CER) — spektroskopija. Savo ruožtu, teoriškai modeliuojant QD/QR energijos lygmenis galima išsamiai apibendrinti ir prognozuoti kvantinių taškų fotoatsaką terahercinės (THz) fotonikos elementų kūrimo reikmėms.

## Darbo tikslas

Siekiant nustatyti optimalius fizikinius parametrus ir technologines sąlygas aktualių mikro- ir opto-elektronikos komponentų kūrimui bei plėtojimui, panaudojant kombinuotus InGaAs kvantinių taškų darinius (kvantiniai taškai, įterpti į supergardelę ir į sudėtinę kvantinę duobę; kvantinių taškų formos inžinerija — kvantiniai strypeliai), būtina išsamiai žinoti tokių nanodarinių optines savybes bei elektroninę sandarą. Šiuo tikslu numatoma:

- ◇ charakterizuoti ir ištirti tarpjuostinių optinių šuolių skirtingo dizaino InGaAs kvantinių taškų struktūrose visumą, taikant moduliuto atspindžio ir fotoluminescencijos spektroskopijas;
- ◇ atskleisti kvantinio taško morfologijos ir jį supančios aplinkos (matricos) poveikį InGaAs kvantinių taškų darinių optinėms savybėms ir elektroninei sandarai.

## Tirti kvantinių taškų nanodariniai

Šiame darbe tiriami kombinuoti InAs kvantinių taškų (QD), įterptų į kvantinę duobę (QW) ir į supergardelę (SL), bei įvairios morfologijos koloninių InGaAs kvantinių taškų arba kvantinių strypelių (QR) dariniai:

- a) InAs QD, įterpti į GaAs matricą arba į GaAs/AlAs supergardelę (QD-SL);
- b) InAs QD be ir su InGaAs sluoksniu, įterpti į GaAs/AlAs QW (DWELL);
- c) InGaAs QR, įterpti į InGaAs QW, ir epitaksiškai auginti su  $As_2/As_4$  šaltiniu.

## Darbo uždaviniai

1. Modernizuoti moduliuto atspindžio — fotoatspindžio ir bekontakčio elektrinio atspindžio — bei fotoluminescencijos standus, įdiegiant ir pritaikant naują optinę įrangą (lazeriniai šviesos šaltiniai, fotodetektoriai, monochromatoriaus gardelės) InGaAs kvantinių taškų nanodarinių optinio charakterizavimo reikmėms.
2. Spektroskopiškai ištirti InAs/GaAs/AlAs QD-SL bei InAs/InGaAs/GaAs/AlAs DWELL darinių tarpjuostinių šuolių visumą ir nustatyti šių nanodarinių elektroninę sandarą.
3. Išanalizuoti skirtingos morfologijos InGaAs kvantinių strypelių optines savybes, jų optinės anizotropijos prigimtį ir elektroninę sandarą bei įvertinti  $As_2$  ir  $As_4$  auginimo šaltinių poveikį joms.



4. Skaitmeniškai ir analitiškai sumodeliuoti tiriamųjų InGaAs QD darinių elektronų energijos spektrą.

## Mokslinis naujumas

Šiame darbe pirmą kartą atliekamas kompleksinis InGaAs kvantinių taškų darinių tyrimas jautriais moduliacinės spektroskopijos metodais. Tiriant kombinuotų InAs kvantinių taškų (QD), įterptų į GaAs/AlAs supergardelę (SL) [QD-SL] ir į sudėtinę InGaAs/GaAs/AlAs kvantinę duobę (DWELL), nanodarinius pirmą kartą atskleista:

- a) InAs drėkinančiojo sluoksnio (WL) plonėjimas ir atitinkamas InAs kvantinio taško dydžio augimas QD-SL darinio auginimo kryptimi;
- b) InAs kvantinius taškus supančiosios terpės — GaAs/AlAs supergardelės (QD-SL darinys) ir įtempimus sumažinančio InGaAs (DWELL darinys) sluoksnio — įtaka elektronų energijos lygmenims ir tarpjuostiniams optiniams šuoliams.

Spektroskopiškai tiriant epitaksinių InGaAs kvantinių strypelių (QR), įterptų į InGaAs kvantinę duobę, darinius pirmą kartą nustatyta:

- a) As šaltinio ( $As_2$  ir  $As_4$ ) poveikis QR optinėms savybėms ir elektroninei sandarai;
- b) optinės anizotropijos dėsningumai, susiję su tarpjuostiniais optiniais šuoliais tarp pagrindinių InGaAs QR lygmenų.

## Praktinė vertė

Kuriant ir vystant naujas puslaidininkinių nanodarinių medžiagas, kurios turėtų norimas savybes ir galėtų būti panaudotos kaip aktyvieji optoelektronikos, infraraudonosios ar terahercinės fotonikos komponentai, būtina išsamiai žinoti jų elektroninę sandarą ir gerai suprasti jų optines savybes lemiančius veiksnius, kaip antai, technologinių auginimo sąlygų įtaką, vidinių elektrinių laukų ir defektų ar legiruojančių priemaišų poveikį. Atlikti InGaAs kvantinių taškų darinių išsamūs spektroskopiniai-optiniai tyrimai ir jų rezultatų teorinė analizė yra tiesiogiai susiję su QD kaip funkcinių elementų praktiniu taikymu optoelektronikos prietaisuose.

Disertacijoje yra parodyta, kad nanodarinių energijos spektrų tyrimams, medžiaginės sudėties nustatymui bei technologinių sąlygų įtakos įvertinimui gali būti sėkmingai net ir kambario temperatūroje taikomos jautrios moduliavimo atspindžio — fotoatspindžio ir bekontakčio elektrinio atspindžio — eksperimentinės metodikos.

Ypatingą svarbą taikymams turi spektroskopiniai duomenys apie InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs matricą ir į GaAs/AlAs supergardelę, optinius ypatumus, kurie atskleidžia šių nanodarinių elektroninės sandaros priklausomybę nuo InAs QD, InAs

drėkinančiojo sluoksnio ir GaAs/AlAs SL parametrų. Įtempimų įtaka yra svarbus veiksnys plėtojant kvantinių taškų savybėmis paremtus prietaisus. InAs QD, įterptų į GaAs/AlAs ir į sudėtinę InGaAs/GaAs/AlAs kvantinę duobę, darinių elektroninės sandaros tyrimai atskleidė, kad dėl įtempimus sumažinančio InGaAs sluoksnio tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių QD būsenų energija sumažėja apie 100 meV, o tai svarbu projektuojant IR jutiklius, veikiančius 3–5 μm ir 8–12 μm spektriniuose atmosferos „languose“, bei 1.3 μm ir 1,55 μm bangos ilgio lazerius telekomunikacijoms.

Kvantinių strypelių pritaikymui optoelektronikoje būtina suprasti jų optines savybes, susijusias su šviesos poliarizacija. Vieną esminių savybių — neigiamą poliarizacijos laipsnį — suradome tirdami InGaAs QR optinę anizotropiją. Šis rezultatas yra svarbus ne tik siekiant sukurti nuo šviesos poliarizacijos nepriklausantį puslaidinikinį optinį stiprintuvą šviesolaidinėms telekomunikacijoms, bet ir apskritai leidžia prognozuoti kvantinių taškų fotoatsaką THz fotonikos elementų kūrimo tikslais.

## Ginamieji teiginiai

- I. InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs/AlAs supergardelę, darinyje optinių šuolių energijų mėlynasis poslinkis ir intensyvumo padidėjimas InAs drėkinančiajame sluoksnyje yra nulemti erdvinio apribojimo efektų, o spektro linijų suskilimas yra sietinas su drėkinančiojo sluoksnio storio kitimu išilgai auginimo krypties.
- II. Tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių InAs kvantinio taško, įterpto į sudėtinę InGaAs/GaAs/AlAs kvantinę duobę, būsenų raudonąjį energijų poslinkį nulemia įtempimų sumažėjimas ir taško padidėjimas.
- III. InGaAs kvantinių strypelių auginimas naudojant  $As_4$  šaltinį lemia didesnį fotoluminescencijos intensyvumą ir tarpjuostinių optinių šuolių energijų raudonąjį poslinkį, kurie yra sietini su stipresniu kvantiniu ribojimu dėl didesnio In kiekio kontrasto tarp InGaAs kvantinių strypelių ir juos supančios InGaAs duobės.
- IV. InGaAs kvantinių strypelių  $TM_{[001]}$  modos intensyvumas yra didesnis už  $TE_{[110]}$ , bet mažesnis už  $TE_{[1\bar{1}0]}$  modos intensyvumą dėl didelio ( $\approx 60\%$ ) poliarizacijos laipsnio darinio (001)-plokštumoje. Tarpjuostinių šuolių tarp pagrindinių būsenų optinė anizotropija yra susijusi su skylių banginių funkcijų orientacija išilgai  $[1\bar{1}0]$  krypties ir lengvųjų bei sunkiųjų skylių pajuosčių maišymusi.
- V. Pasiūlytas analitinis kvantinių taškų elektronų energijos spektro skaičiavimo metodas, paremtas kintamųjų atskyrimo artiniu. Metodas gerai aprašo spektroskopiškai tirtų InAs kvantinių taškų bei InGaAs kvantinių strypelių darinių ir pagrindinę, ir sužadintąsias būsenas.

## Disertacijos darbo rezultatų viešinimas

Šiame skyriuje chronologine tvarka pateikiami mokslinių publikacijų ir pranešimų mokslinėse konferencijose sąrašai.

### Mokslinės publikacijos

Pagrindiniai disertacinio darbo rezultatai buvo paskelbti septyniuose recenzuojamuose mokslo leidiniuose, įtrauktuose į Thomson ISI Web of Science sąrašą:

- [1.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Krivaitė, V. Tamošiūnas, G. Valušis, F. F. Schrey, K. Unterrainer, G. Strasser, *Energy Spectrum of InAs Quantum Dots in GaAs/AlAs Superlattices*. Acta Phys. Pol. A **113**, 975 (2008).
- [2.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, A. Čerškus, J. Kundrotas, V. Karpus, V. Tamošiūnas, G. Valušis, G. Fasching, K. Unterrainer, G. Strasser, *Optical study of InAs quantum dot stacks embedded in GaAs/AlAs superlattices*. Phys. Status Solidi C **6** (12), 2710 (2009).
- [3.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, D. Seliuta, V. Tamošiūnas, G. Valušis, G. Fasching, K. Unterrainer, G. Strasser, *Modulated reflectance study of InAs quantum dot stacks embedded in GaAs/AlAs superlattice*, J. Appl. Phys. **106**, 064308 (2009).
- [4.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, D. Seliuta, V. Tamošiūnas, G. Valušis, F. F. Schrey, K. Unterrainer, G. Strasser, *Electronic Structure of InAs Quantum Dots in GaAs/AlAs Superlattice*. AIP Conf. Proc. **1199** (1), 283 (2010).
- [5.§] R. Nedzinskas, V. Karpus, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Photoreflectance of Epitaxial InGaAs Quantum Rods*. Acta Phys. Pol. A **119** 164 (2011).
- [6.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, V. Karpus, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Photoreflectance and photoluminescence studies of epitaxial InGaAs quantum rods grown with As<sub>2</sub> and As<sub>4</sub> sources*. J. Appl. Phys. **109**, 123526 (2011).
- [7.§] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, A. Česnauskas, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Electronic structure and optical anisotropy of InGaAs quantum rods studied by photoreflectance and photoluminescence*. Phys. Status Solidi C **9** (7), 1640 (2012).

Disertacinio darbo rezultatai taip pat buvo pristatyti mokslinėse konferencijose: 9 pranešimai tarptautinėse ir 10 nacionalinėse (iš jų 7 studentų/doktorantų).

## Tarptautinės konferencijos

- [1.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Krivaitė, V. Tamošiūnas, G. Valušis, F. F. Schrey, K. Unterrainer, G. Strasser, *Energy Spectrum of InAs Quantum Dots in GaAs/AlAs Superlattices*. // 13th International Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors (UFPS-2007). August 26–29, 2007. Vilnius, Lithuania.
- [2.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, D. Seliuta, V. Tamošiūnas, G. Valušis, F. F. Schrey, K. Unterrainer, G. Strasser, *Electronic Structure of InAs Quantum Dots in GaAs/AlAs Superlattice*. // 29th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-2008). July 27 – August 1, 2008. Rio de Janeiro, Brazil.
- [3.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, A. Čerškus, J. Kundrotas, V. Karpus, V. Tamošiūnas, G. Valušis, G. Fasching, K. Unterrainer, G. Strasser, *Optical study of InAs quantum dot stacks embedded in GaAs/AlAs superlattices*. // 15th Semiconductor and Insulating Materials Conference (SIMC-2009). June 15–19, 2009. Vilnius, Lithuania.
- [4.t] R. Nedzinskas, V. Karpus, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Photoreflectance of epitaxial InGaAs quantum rods*. // 14th International Symposium on Ultrafast Phenomena in Semiconductors (UFPS-2010). August 23–25, 2010. Vilnius, Lithuania.
- [5.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, A. Česnauskas, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Electronic structure and optical anisotropy of InGaAs quantum rods*. // 16th Semiconducting and Insulating Materials Conference (SIMC-2011). June 19–23, 2011. Stockholm, Sweden.
- [6.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, G. Valušis, L. H. Li, E. H. Linfield, *Modulation spectroscopy of epitaxial InGaAs nanorods*. // COST (European Cooperation in Science and Technology) Training School on “Epitaxy and Structural Analysis of III-V-N Semiconductor Nanostructures”, April 29 – May 2, 2012. Heraklion-Crete, Greece.
- [7.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Polarized photoreflectance and photoluminescence spectroscopy of InGaAs/GaAs quantum rods grown with As<sub>2</sub> and As<sub>4</sub> sources*. // 17th International Conference on Superlattices, Nanostructures, and Nano-devices (ICSNN-2012). July 22–27, 2012. Dresden, Germany.

- [8.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Photoreflectance and photoluminescence study of InAs dots-in-a-well nanostructures*. // 31st International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-2012). July 29 – August 3, 2012. Zurich, Switzerland.
- [9.t] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *Comparative optical study of epitaxial InGaAs quantum rods grown with As<sub>2</sub> and As<sub>4</sub> sources* // 31st International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS-2012). July 29 – August 3, 2012. Zurich, Switzerland.

### Nacionalinės konferencijos

- [1.n] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, L. H. Li, S. P. Khanna, E. H. Linfield, *InAs kvantinių taškų darinių elektroninių lygmenų tyrimas fotoatspindžio metodu*. // 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Vilniaus universitetas, 2011 m. spalio 6–8 d., Vilnius.
- [2.n] R. Nedzinskas, R. Paulauskas, B. Čechavičius, V. Karpus. *Tarpjuostiniai optiniai šuoliai sudėtinėje kvantinėje duobėje*. // 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Vilniaus universitetas, 2011 m. spalio 6–8 d., Vilnius.
- [3.n] R. Nedzinskas, V. Karpus. *Adiabatinis modelis cilindrinų kvantinių taškų ir strypelių energijos spektro skaičiavimams*. // 39-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Vilniaus universitetas, 2011 m. spalio 6–8 d., Vilnius.

### Studentų/doktorantų konferencijos

- [1.s] R. Nedzinskas, V. Karpus, *Adiabatinis modelis saviformuojančių kvantinių taškų energijos spektro skaičiavimams* // 12-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas — Lietuvos ateitis“. Fizika ir fizinė kompiuterija. Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2009 m. balandžio 2 d., Vilnius.
- [2.s] R. Nedzinskas, B. Čechavičius, *Kvantinių InGaAs strypelių optinio atsako tyrimas*. // 13-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas — Lietuvos ateitis“. Fizika ir fizinė kompiuterija. Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2010 m. balandžio 23 d., Vilnius.
- [3.s] R. Paulauskas, R. Nedzinskas, B. Čechavičius, *Virtualūs lygmenys kvantinių strypelių heterodariniuose*. // 13-oji Lietuvos jaunųjų mokslininkų konferencija „Mokslas — Lietuvos ateitis“. Fizika ir fizinė kompiuterija. Vilniaus Gedimino technikos universitetas, 2010 m. balandžio 23 d., Vilnius.

- [4.s] A. Česnauskas, R. Nedzinskas, *InGaAs kvantinių strypelių moduluoto fotoatspindžio spektrai*. // Studentų moksliniai darbai. Lietuvos mokslo taryba, 2010 m. gegužės 14–15 d., Vilnius.
- [5.s] R. Paulauskas, B. Čechavičius, R. Nedzinskas, *Optinio kompozitinių kvantinių duobių atsako ypatumai*. // Studentų moksliniai darbai. Lietuvos mokslo taryba, 2010 m. gegužės 14–15 d., Vilnius.
- [6.s] R. Nedzinskas, *InGaAs kvantinių strypelių fotoatspindžio spektroskopija*. // 1-oji Doktorantų ir jaunųjų mokslininkų konferencija. Fizinių ir technologijos mokslų centras, 2010 m. lapkričio 18–19 d., Vilnius.
- [7.s] R. Nedzinskas, *InGaAs nanostrypelių energijos spektras ir optinė anizotropija*. // 2-oji Doktorantų ir jaunųjų mokslininkų konferencija. Fizinių ir technologijos mokslų centras, 2011 m. lapkričio 24–25 d., Vilnius.

### **Kiti mokslo darbai, neįtraukti į disertaciją**

- [‡.§] B. Čechavičius, R. Nedzinskas, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, B. Sherliker, M. Halsall, P. Harrison, E. Linfield, and M. Steer, *Study of Excitonic Transitions in  $\delta$ -doped GaAs/AlAs Quantum Wells*. Lith. J. Phys. **49** (3), 291 (2009).
- [‡.n] B. Čechavičius, R. Nedzinskas, J. Kavaliauskas, V. Karpus, G. Valušis, B. Sherliker, M. Halsall, P. Harrison, E. Linfield, M. Steer, *Eksitoninių šuolių GaAs/AlAs kvantinėse duobėse su priemaišomis tyrimas*. // 38-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Vilniaus universitetas, 2009 m. birželio 6–8 d., Vilnius.

### **Disertacijos sandara**

Anglų kalba parašytą disertaciją sudaro (eilės tvarka): įvadas, santraukos anglų bei lietuvių kalbomis, disertanto publikuotų mokslinių straipsnių ir mokslinių pranešimų konferencijose sąrašai; darbe tirtų struktūrų eksperimentinės metodologijos (bendroji apžvalga), jų epitaksinio auginimo ir aktualios literatūros apžvalga; bandinių ir eksperimentinės metodologijos (tikslinė apžvalga) skyrius; kvantinių taškų darinių optinių savybių tyrimų skyrius ir kvantinių taškų darinių elektronų būsenų teorinės analizės skyrius, kuriame aprašomas sukurtas analitinis modelis. Disertacijos pabaigoje pateikiami pagrindiniai rezultatai ir išvados bei cituojamos literatūros sąrašas.

# DISERTACIJOS APRAŠYMAS

## Įvadas

Įvadiniame skyriuje pagrindžiamas disertacinio darbo aktualumas, suformuluojami darbo tikslas ir uždaviniai, aptariami disertacijos naujumas ir praktinė vertė, pristatomi ginamieji teiginiai ir pateikiamas mokslinių publikacijų disertacijos tema ir tikslinių pranešimų tarptautinėse bei nacionalinėse konferencijose sąrašas.

## 1 Puslaidininkiniai kvantiniai taškai — apžvalga

Šio skyriaus pradžioje supažindinama su puslaidininkinių nanodarinių eksperimentinių spektrų tyrimams sėkmingai Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkių fizikos instituto Puslaidininkių optikos laboratorijoje taikoma moduliacine spektroskopija, jos atskirais metodais. Toliau yra aprašoma saviformuojančių kvantinių taškų darinių auginimui naudota molekulinio pluoštelio epitaksija ir taškų morfologinio formavimosi auginimo metu mechanizmai. Skyrius baigiamas literatūros apžvalga, kurioje plačiau supažindinama su tiriamųjų kvantinių taškų nanodarinių problematika ir aktualijomis. Apžvelgiant literatūrą nurodoma, kokie konkretūs tyrimai nebuvo tuo metu vykdomi, taip pabrėžiant mūsų atliktų ir disertacijoje aprašomų tyrimų indėlį ir vertę.

## 2 Bandiniai ir eksperimento metodika

Šiame skyriuje apžvelgiami tirtų InGaAs kvantinių taškų darinių bandiniai:

- ◇ InAs kvantiniai taškai, įterpti į GaAs/AlAs supergardelę (bandinys #577) arba GaAs matricą (bandinys #469);
- ◇ InAs kvantiniai taškai su (bandinys L442) ir be (bandinys L444) įtempimus sumažinančio InGaAs sluoksnio, įterpti į GaAs/AlAs kvantinę duobę;
- ◇ skirtingo aukščio (20 nm, 32 nm ir 41 nm) InGaAs kvantiniai strypeliai, įterpti į InGaAs kvantinę duobę, ir epitaksiškai auginėti, naudojant  $As_2$  arba  $As_4$  šaltinių (bandiniai L396–L402).

Pateikiamos kiekvieno nanodarinio schemos, juostinės diagramos, auginimo protokoliai, TEM struktūrinės analizės mikrografijos ir kt.

Skyriaus antroje dalyje detaliai aprašomas eksperimentinis nanodarinių optinių tyrimų standas. Pateikiami moduliuto atspindžio — fotoatspindžio (PR) ir bekontaktinio elektrinio atspindžio (CER) — bei fotoluminescencijos (PL) spektroskopijų ypatumai ir pritaikymas konkrečioms optinių savybių spektrinėms grupėms tirti. Moduliacinė spektroskopija pasižymi dideliu matavimų jautrumu ( $\Delta R/R = 10^{-4}$ – $10^{-5}$ ) net ir kambario temperatūroje, o tai leidžia efektyviai tirti kvantinių darinių optines savybes ir tuo būdu atskleisti išsamią nanodarinių elektroninę sandarą.

### 3 Kvantinių taškų darinių optinės savybės

Šis skyrius — pirmoji originalioji disertacijos dalis.

Skyriuje pateikiami visų tipų InGaAs kvantinių taškų darinių eksperimento ir skaitmeninio modeliavimo rezultatai. Eksperimentiniai nanostruktūrų tyrimai buvo atlikti taikant moduliuto atspindžio (PR ir CER) bei PL spektroskopijas. Skaitmeniniai skaičiavimai, kurie reikalingi InGaAs kvantinių taškų moduliuto atspindžio spektrų interpretacijai, buvo atlikti naudojant programinę įrangą *nextnano*<sup>3</sup>.<sup>1</sup>

Modeliavimo metu pirmiausia yra pasirenkami kvantinio taško parametrai: forma, matmenys ir heterodarinio medžiaginė sudėtis. Tuomet suskaičiuojami įtempimų pasiskirstymas kvantiniame taške ir jo aplinkoje bei potencinis kvantinio taško reljefas. Galiausiai, sprendžiant trimates Schrödingerio ir Poissono lygtis, yra suskaičiuojamos kvantinio taško elektroninės būsenos. Energijos lygmenų spektrą skaičiuojame pasirinkę įprastinę lęšio formos kvantinio taško geometriją, taikydami vienos juostos efektingą masės artinį, o medžiagų parametrus ėmėme iš šaltinio [7].

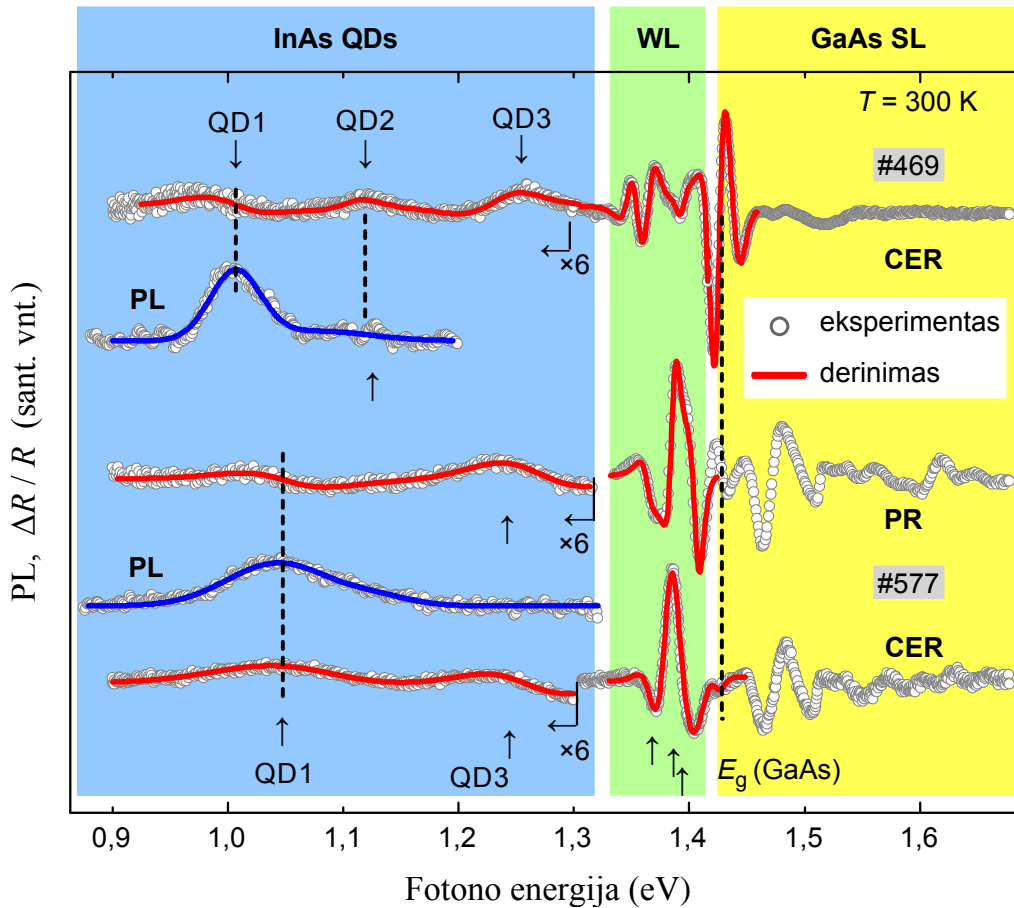
#### 3.1 InAs kvantinių taškų GaAs/AlAs supergardenėje energijos lygmenų spektras

Eksperimentiniai nanostruktūrų, sudarytų iš InAs kvantinių taškų (QD), įterptų į GaAs matricą, o taip pat į GaAs/AlAs supergardenę (SL), tyrimai buvo atlikti taikant moduliuto atspindžio spektroskopiją. Tyrime išsamiai analizuojama drėkinančiojo sluoksnio ir kvantinės duobės (WL-QW) sistema, kurią formuoja InAs WL ir GaAs/AlAs SL [1–4.§]. Spektrų analizei naudojami PL palyginamieji rezultatai ir teoriniai-skaitmeniniai tyrimai.

InAs QD, įterptų į GaAs matricą (bandinys #469), o taip pat į GaAs/AlAs supergardenę (#577), darinių CER/PR spektrai, išmatuoti kambario temperatūroje, pavaizduoti 1 pav. Moduliuto atspindžio spektruose galima išskirti tris optinių ypatumų grupes. Pirmoji apima fotono energijų skalę 1,42–1,7 eV srityje, kurioje ypatumai yra susiję su optiniais šuoliais GaAs buferiniame sluoksnyje (#469) arba GaAs

<sup>1</sup>Puslaidininkinių nanodarinių modeliavimo programa. Puslapis internete: <http://www.nextnano.de/>





1 pav. InAs QD įterptų į GaAs matricą (viršutinė kreivė, #469) ir GaAs/AlAs SL (apatinė ir vidurinė kreivės, #577) moduluoto atspindžio spektrai. Rodyklės žymi tarpjuostinių šuolių energijas, nustatytas analizuojant spektrus. PL spektrai pavaizduoti lyginamajai analizei.

buferiniame sluoksnyje ir GaAs/AlAs SL (#577). Antroji ypatumų grupė plyti energijų srityje vos žemiau GaAs draustinių energijų juostos tarpo (1,42 eV). Čia stebimi optiniai šuoliai InAs WL-QW sistemoje, kuri susiformuoja GaAs kvantinėje duobėje (#469) arba GaAs/AlAs supergardenėje (#577). Trečioji ypatumų grupė apima žemutinę fotonų energijų skalę, 0,9–1,3 eV. Šioje srityje PR ir CER spektrų ypatumai QD1–QD3 yra sietini su tarpjuostiniais optiniais šuoliais tarp pagrindinių ir sužadintųjų elektronų bei sunkiųjų skylių būsenų InAs kvantiniame taške.

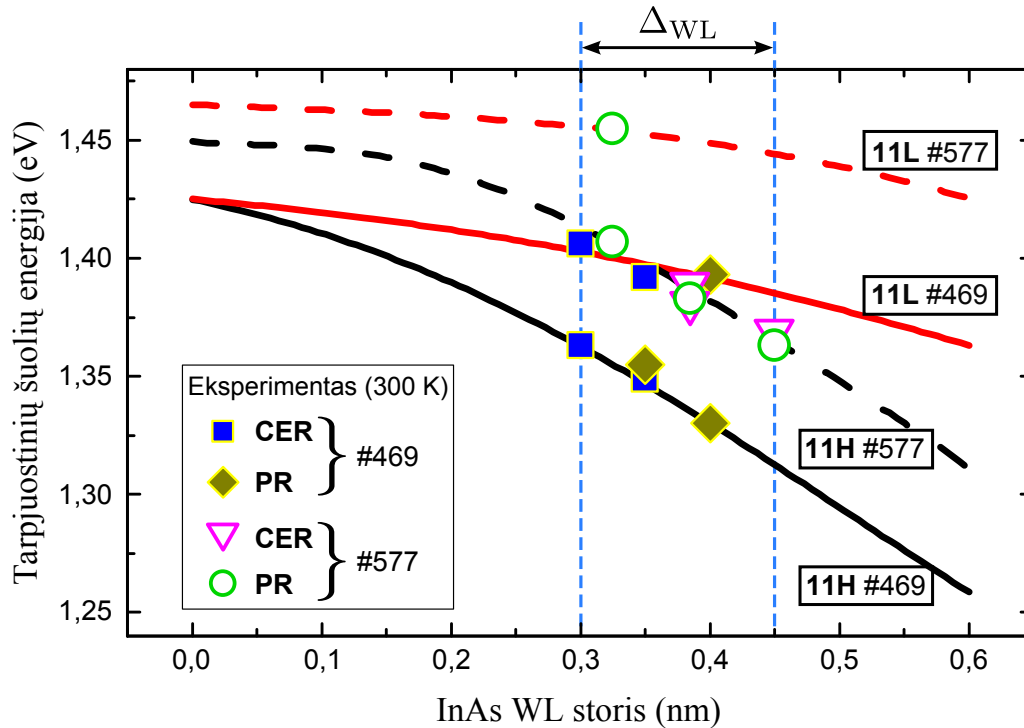
Spektroskopiniai-optiniai InAs QD darinių ypatumai buvo analizuojami eksperimentinius rezultatus derinant su Lorentzo tipo funkcijos pirmąja išvestine. Tokiu būdu buvo nustatytos tarpjuostinių optinių šuolių energijos ir išplitimo parametrai. Moduluoto atspindžio (CER/PR) bei PL spektruose stebimas spektrinių linijų išplitimas yra sietinas su kvantinių taškų ir kvantinių duobių dydžių ir storių fluktuacijomis tiek sluoksniuose, tiek ir tarp sluoksnių nanodarinių auginimo kryptimi.

**Kvantinių taškų optiniai ypatumai** PR/CER spektrai 1 pav. rodo, kad QD1 ypatumai abiejų bandinių atveju yra ties PL kreivių maksimumais ir žymi optinius šuolius tarp pagrindinių kvantinio taško energijos lygmenų. Eksperimente stebimas

#577 bandinio QD1 ypatumų mėlynasis energijų poslinkis #469 bandinio atžvilgiu siekia apie 50 meV dėl įterpto AlAs barjero (abiejų bandinių auginimo sąlygos vienos). Aukštesniųjų fotono energijų srityje CER spektro QD2 ypatumas (#469) žymi optinius šuolius tarp žemiausių sužadintųjų QD būsenų. Pažymėtina, kad eksperimentinės #469 bandinio QD1 ir QD2 optinių šuolių energijų vertės gerai dera su apskaičiuotomis. Verta pažymėti, kad QD2 ypatumas nėra ryškus #577 bandinio atveju dėl QD dydžių fliuktuacijų išilgai sluoksnių supergardelėje. Didžiausios energijos QD3 ypatumai iš pirmo žvilgsnio gali būti susiję su tarpjuostiniais šuoliais tarp aukštesniųjų sužadintųjų QD būsenų. Visgi, QD3 energijos yra žymiai didesnės lyginant su apskaičiuotomis, todėl QD3 ypatumus nulemia optiniai šuoliai tarp mažesnio dydžio kvantinių taškų pagrindinių būsenų. Išties, tokie mažesnieji QD formuojasi pradinėje auginimo fazėje — tai patvirtina ir skirtingo bangos ilgio žadinančiosios spinduliuotės PL tyrimo rezultatai [2.§], ir šių nanodarinių TEM mikrografijos [3].

**Drėkinančiojo sluoksnio optiniai ypatumai** Optiniai ypatumai energijų srityje 1,35–1,41 eV žymi tarpjuostinius šuolius InAs WL-QW sistemoje. Paprastai InAs/GaAs kvantinėje duobėje, kaip parodė atlikti teoriniai skaičiavimai, yra stebimi dviejų rūšių tarpjuostiniai šuoliai — tarp pagrindinių elektrono ir sunkiųjų- (11H) bei lengvųjų-skylių (11L) lygmenų. Analizuojant WL-QW ypatumus (1 pav.), tenka imti domėn dubletinį 11H ir 11L šuolių pobūdį. Atrodytų, kad tokį suskilimą galima apibūdinti elektronine sąveika tarp gretimų WL-QW, tačiau detalesnė analizė parodė, jog 11H ir 11L optinių šuolių suskilimas yra susijęs su InAs drėkinančiojo sluoksnio parametrų kitimu išilgai kvantinių taškų supergardelės. Svarbu pabrėžti, kad CER signalą lemia tik paviršiniai QD sluoksniai, tuo tarpu PR signalą — ir gilūs QD sluoksniai. Taigi, skirtingo storio sluoksnių indėlis duoda ypatumais daugialypį suminį spektrą. Be to, toks spektro suskilimas koreliuoja su stebimais skirtingo dydžio kvantinių taškų ansamblių CER/PR fotoatsakais QD energijų srityje.

Drėkinančiojo InAs sluoksnio storio kitimas,  $\Delta_{WL}$ , išilgai bandinių auginimo krypties buvo įvertintas skaitmeniškai modeliuojant InAs/GaAs/AlAs heterodarinio 11H ir 11L šuolių energijas. Derinant eksperimento ir skaičiavimų rezultatus (2 pav.) nustatyta, kad WL storis kinta nuo 1,5 ML iki 1 ML kvantinio darinio auginimo kryptimi. Atitinkamai savitvarčių QD dydis vertikaloje QD sluoksnių sekoje auga dėl vidinių įtempimų sluoksniuose, o tai, savo ruožtu, lemia WL plonėjimą. Be to, 2 pav. matyti, kad dėl AlAs barjerų eksperimentinės 11H ir 11L šuolių energijos padidėja. Tai seka ir iš sudėtinės InAs/GaAs/AlAs QW elektronų energijos lygmenų spektro skaitmeninio modeliavimo duomenų. Gauti spektroskopiniai ir modelinių skaičiavimų rezultatai atskleidė InAs QD, InAs WL ir GaAs/AlAs SL parametrų tarpusavio įtaką susidarant kombinuotai InAs/GaAs/AlAs kvantinei sistemai. Nustatyta, kad heterostrukūros elektronų energijos lygmenys iš esmės priklauso ir nuo AlAs barjero



**2 pav.** InAs QD, įterptų į GaAs matricą (#469), ir QD-SL (#577) darinių eksperimentiniai (simboliai) ir modeliavimo (kreivės) rezultatai, žymintys tarpjuostinius šuolius InAs WL-QW.

buvimo, ir nuo InAs sluoksnio padėties barjero atžvilgiu. Skaitmeniniai skaičiavimai atskleidė įdomią InAs/GaAs/AlAs heterodarinio savybę — jo elektronų energijos lygmenys „osciliuoja“ kintant QD atstumui nuo AlAs barjero kartu su GaAs/AlAs QW banginės funkcijos modulio kvadratu.

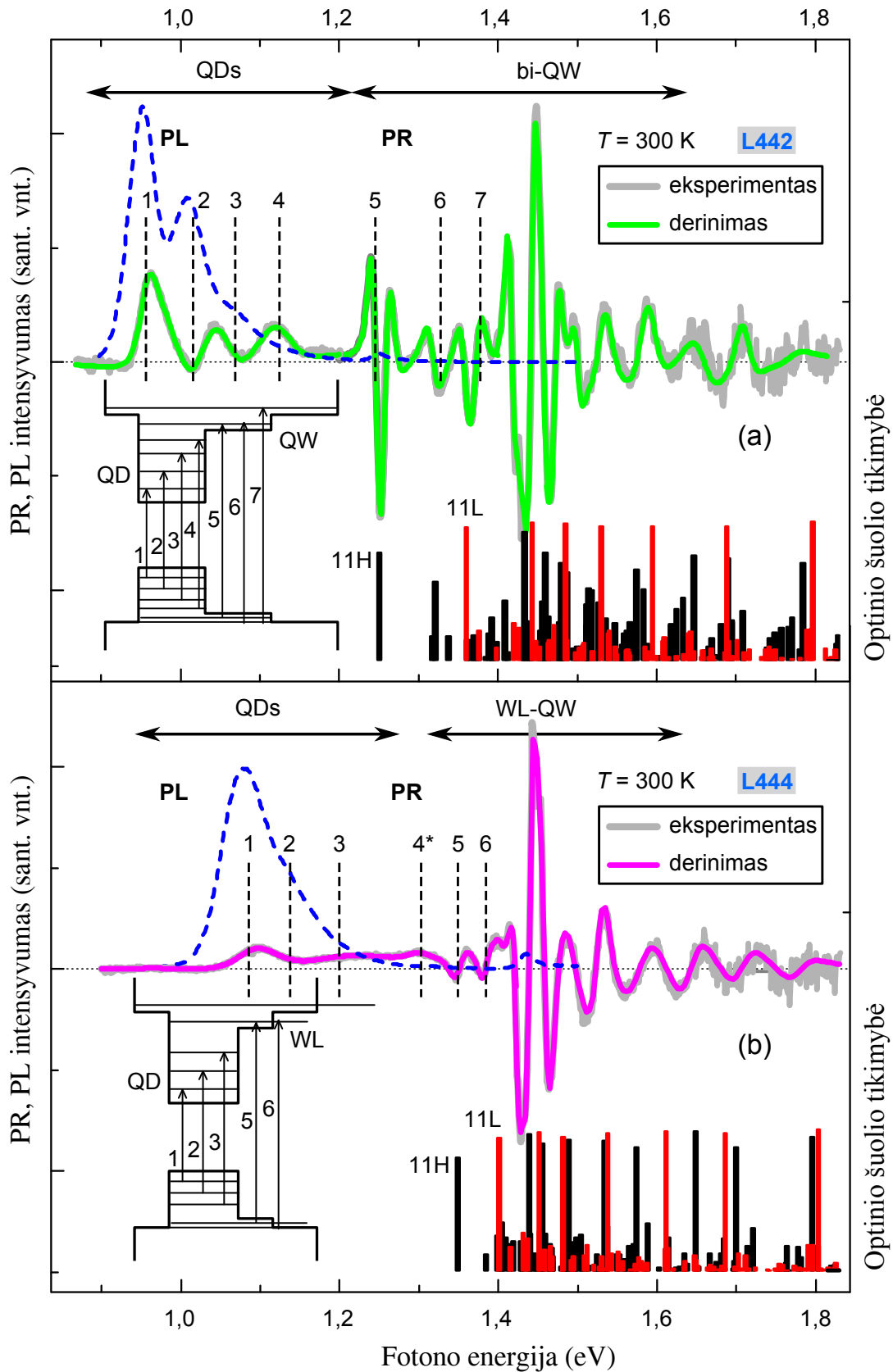
*Ginamasis teiginys*, apibendrinantis ištirtus InAs/GaAs QD darinių be ir su AlAs barjeriais optinius ypatumus

InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs/AlAs supergardelę, darinyje optinių šuolių energijų mėlynasis poslinkis ir intensyvumo padidėjimas InAs drėkinančiajame sluoksnyje yra nulemti erdvinio apribojimo efektų, o spektro linijų suskilimas yra sietinas su drėkinančiojo sluoksnio storio kitimu išilgai auginimo krypties.

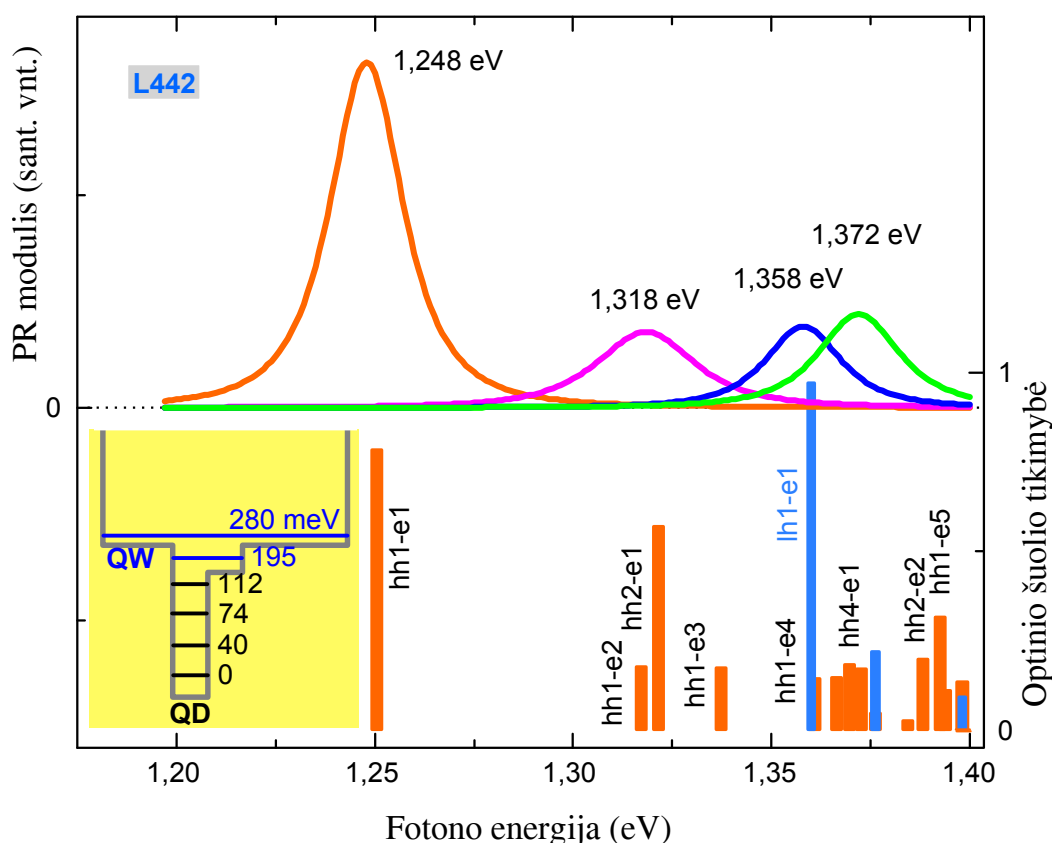
### 3.2 InAs kvantinių taškų sudėtinėje InGaAs/GaAs/AlAs kvantinėje duobėje energijos spektras

Atlikti palyginamieji InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs/AlAs kvantinę duobę, su (bandinys L442) ir be (bandinys L444) įtempimus sumažinančio InGaAs sluoksnio PR ir PL spektrų tyrimai. Buvo atskleistas tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių kvantinio taško būsenų raudonasis energijų poslinkis (apie 100 meV) darinio su InGaAs sluoksniu atveju (3 pav.).

Šių DWELL nanodarinių eksperimentiniai rezultatai buvo interpretuojami atliekant skaitmeninius skaičiavimus. Iš palyginamosios spektrų analizės nustatyti tokie



**3 pav.** DWELL darinių su (bandinys L442; (a)) ir be (L444; (b)) InGaAs sluoksnio PR ir PL spektrai kambario temperatūroje. Skaitmeninių skaičiavimų rezultatai vaizduojami vertikaliomis kolonėlėmis: spektrinė padėtis žymi šuolio energiją, amplitudė — intensyvumą. Intarpai: DWELL darinių juostinių diagramų schemas ir eksperimentiškai identifikuoti optiniai šuoliai (pažymėti skaitmenimis).



4 pav. PR modulis (kreivės) ir skaitmeninių skaičiavimų rezultatai (vertikalios kolonėlės) DWELL darinio su InGaAs sluoksniu atveju. Spektrinė kolonėlės padėtis žymi šuolio energiją, o amplitudė — intensyvumą. Skylių pajuostės tipas (lh – lengvosios skylės; hh – sunkiosios skylės) ir lygmens pagrindinis kvantinis skaičius nurodytas šalia kolonėlės. Intarpas: elektronų lygmenys kompozitinėje InAs/InGaAs/AlAs QW.

optinių šuolių tipai (numeris rodo optinio ypatumo spektrinę padėtį 3 pav.):

- (1) InAs QD pagrindinės būsenos (GS, abu dariniai);
- (2–4) InAs QD sužadintosios būsenos (ES, abu dariniai);
- (4\*) įtempimų indukuoto QD būsenos (tik L444);
- (5) InAs/InGaAs dvigubos/binarinės QW (bi-QW; L442) arba InAs drėkinančiojo sluoksnio ir GaAs kvantinės duobės sistemos (WL-QW; L444) GS būsenos;
- (6, 7) InAs/InGaAs bi-QW (L442) arba InAs WL-QW (L444) ES būsenos.

**In kiekis InGaAs sluoksnyje** Raudonasis InAs QD spektro linijų poslinkis buvo aiškinamas DWELL darinio su InGaAs sluoksniu skaitmeniniu modeliavimu (4 pav. kolonėlės). Detali palyginamoji eksperimentinių ir skaitmeninio skaičiavimo rezultatų analizė atskleidė, kad In kiekis įtempimus sumažinančiame  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sluoksnyje siekia  $x = 0,13$  ir yra sumažėjęs 2% palyginti su darinio dizainu. Tai, savo ruožtu,

paaškina raudonąjį spektro poslinkį InAs QD srityje — jį sukelia efektinio InAs QD dydžio padidėjimas ir taško formos kitimas dėl In kiekio persiskirstymo tarp InAs QD ir InGaAs sluoksnio auginant nanodarinį. Kita vertus, nors InGaAs sluoksnis ir sumažina įtempimų energiją InAs kvantiniame taške, tačiau QD energijos lygmenys išlieka stipriai kvantuoti — tai akivaizdžiai matyti iš laidumo juostos elektroninės sandaros diagramos (4 pav. Intarpas), kuri buvo nustatyta remiantis eksperimentiniais rezultais.

***Ginamasis teiginys, apibendrinantis ištirtus InAs/GaAs/AlAs DWELL darinių su ir be įtempimus sumažinančio InGaAs sluoksnio optinius ypatumus***

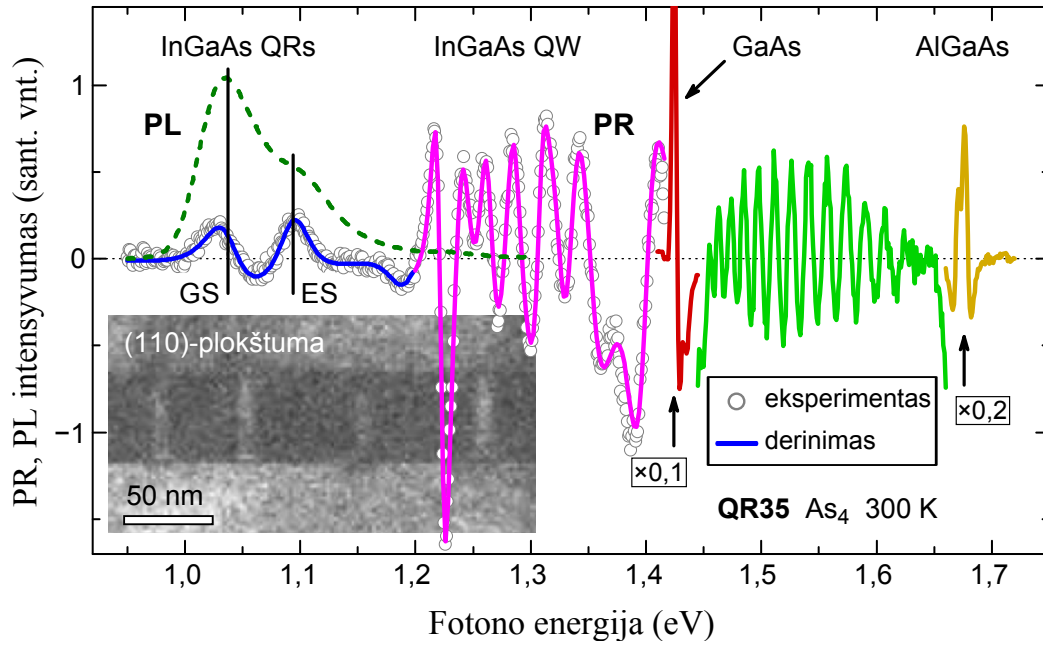
Tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių InAs kvantinio taško, įterpto į sudėtinę InGaAs/GaAs/AlAs kvantinę duobę, būsenų raudonąjį energijų poslinkį nulemia įtempimų sumažėjimas ir taško padidėjimas.

### **3.3 InGaAs kvantinių strypelių InGaAs kvantinėje duobėje energijos spektras**

Spektroskopiniais PR ir PL metodais buvo tiriama skirtingo SL periodų skaičiaus  $N$  (skirtingo aukščio) kvantinių strypelių (QR) bandinių QR $N$  — QR10, QR20 ir QR35 — elektroninė sandara ir optinės savybės [5. §, 6. §]. Eksperimentiniai rezultatai buvo interpretuojami tarpjuostinių optinių šuolių skaitmeniniais skaičiavimais InGaAs QR ir juos supančioje InGaAs QW taikant efektinės masės artinį. Buvo analizuojami optinių šuolių energijų poslinkiai, o taip pat PL intensyvumo kitimas priklausomai nuo struktūrų epitaksinio auginimo metu naudoto As šaltinio tipo ( $As_2$  ir  $As_4$ ).

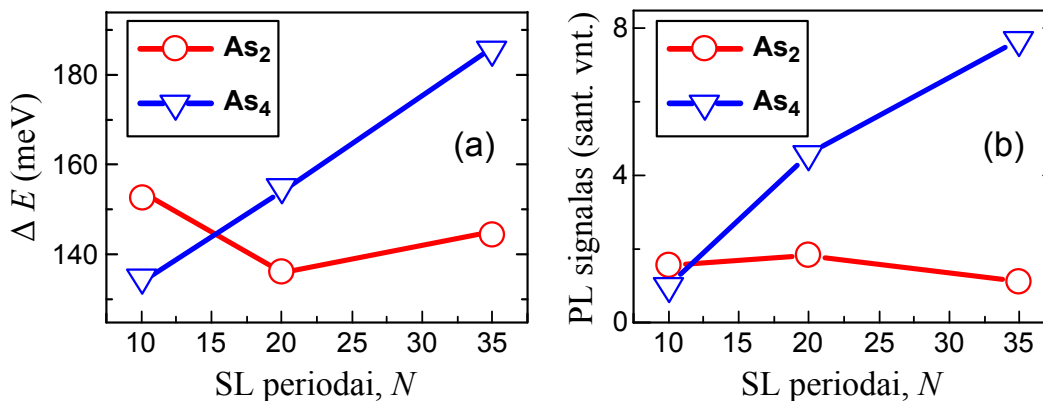
Tipiški InGaAs kvantinių strypelių darinių PR bei PL spektrai kambario temperatūroje yra pavaizduoti 5 pav. Fotoatspindžio spektre galima išskirti keturias ypatumų grupes. Pirmoji, stebima žemųjų energijų srityje ties 1–1,2 eV, yra susijusi su tarpjuostiniais optiniais šuoliais kvantiniuose strypeliuose. Antroji, esanti srityje žemiau GaAs draustinių energijų tarpo 1,2–1,42 eV, siejama su optiniais šuoliais InGaAs kvantinėje duobėje. Trečiojoje spektro ypatumų grupėje ties 1,42–1,67 eV stebimos aiškiai išreikštos PR intensyvumo osciliacijos. Jos sietinos su elektronų šuoliais tarp virtualiųjų lygmenų (InGaAs kvantinės duobės atžvilgiu) kompozitinėje InGaAs/GaAs kvantinėje duobėje. Tai tokios diskretinės elektronų būsenos, kurias atitinkančios energijos yra didesnės už žemiausios GaAs laidumo juostos energiją. Ketvirtoji sritis, esanti ties 1,67 eV, yra susijusi su AlGaAs barjero sluoksniu.

***As<sub>2</sub> versus As<sub>4</sub> įtaka optinėms kvantinių strypelių savybėms*** InGaAs QR dariniai buvo epitaksiškai auginami naudojant  $As_2$  ir  $As_4$  šaltinius. Sublimuojant iš MBE kameros efuzinių celių kristaliniam arsenui pluoštelį sudaro 4 atomų arseno molekulės ( $As_4$ ). Norint auginti sluoksnius su  $As_2$  molekulinio pluoštelio, įtaisomas

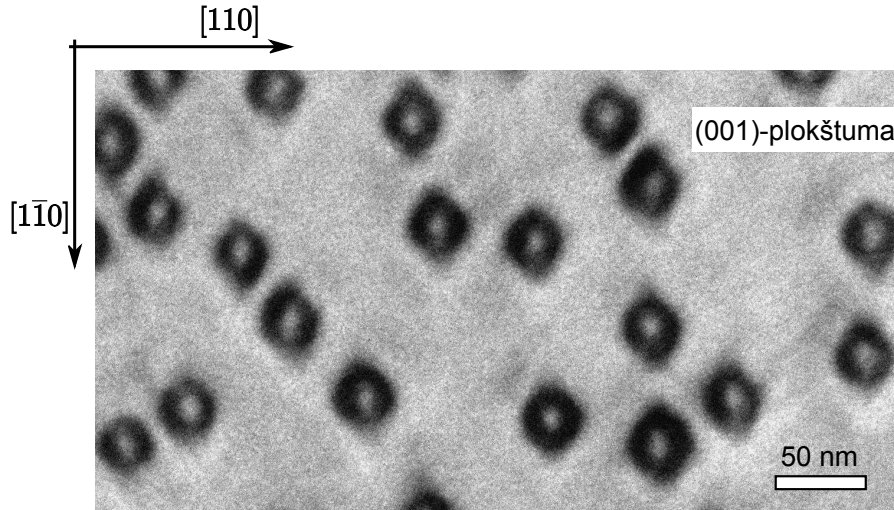


5 pav. InGaAs QR35 darinio PR ir PL spektrai kambario temperatūroje. GS ir ES žymi atitinkamai tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių ir sužadintųjų būsenų energijas. Intarpas: TEM mikrografija, vaizduojanti QR darinio pjūvį (110)-plokštumoje.

papildomas aukštos temperatūros ekranas, su kuriuo susidūrusi  $As_4$  molekulė suskyla į dviatomes:  $As_4 \rightarrow 2As_2$ . Analizuodami  $As$  šaltinio įtaką optinėms QR darinių savybėms ir elektrinei sandarai, tyrėme energijų skirtumo tarp QR ir QW pagrindinių būsenų,  $\Delta E$ , priklausomybę nuo SL periodų skaičiaus (QR aukščio). Iš 6(a) pav. matyti, kad su  $As_4$  šaltiniu augintų strypelių energijų skirtumas  $\Delta E$  yra didesnis aukštiems ( $N \geq 20$ ) strypeliams. Be to, nustatyta, kad PL signalo intensyvumas žymiai padidėja naudojant  $As_4$  šaltinį (6(b) pav.). QR struktūrų, augintų su skirtingais  $As$  šaltiniais, spektriniai pokyčiai optinių šuolių QR ir QW energijų srityse yra sietini su In kiekiu kitimu InGaAs sluoksniuose — didesnis In kiekio kontrastas QR ir QW srityse pasiekiamas auginant su  $As_4$  šaltiniu.



6 pav.  $As$  šaltinio —  $As_2$  ir  $As_4$  — įtaka optinėms skirtingo aukščio QR darinių savybėms. Energijų skirtumo tarp QR ir QW pagrindinių būsenų,  $\Delta E$ , priklausomybė nuo SL periodų skaičiaus (a) ir PL intensyvumo kitimas priklausomai nuo SL periodų skaičiaus (b).



7 pav. QR darinio TEM mikrografija nuo (001)-plokštumos.

Modelinio stačiakampio gretasienio formos QR energijos lygmenų skaitmeniniai skaičiavimai atskleidė, kad žemųjų energijų PR ir PL ypatumai yra susiję su tarpjuostiniais šuoliais tarp sunkiųjų skylių ir elektronų lygmenų, tuo tarpu aukštesniųjų energijų spektrinius ypatumus lemia optiniai šuoliai iš lengvųjų skylių būsenų.

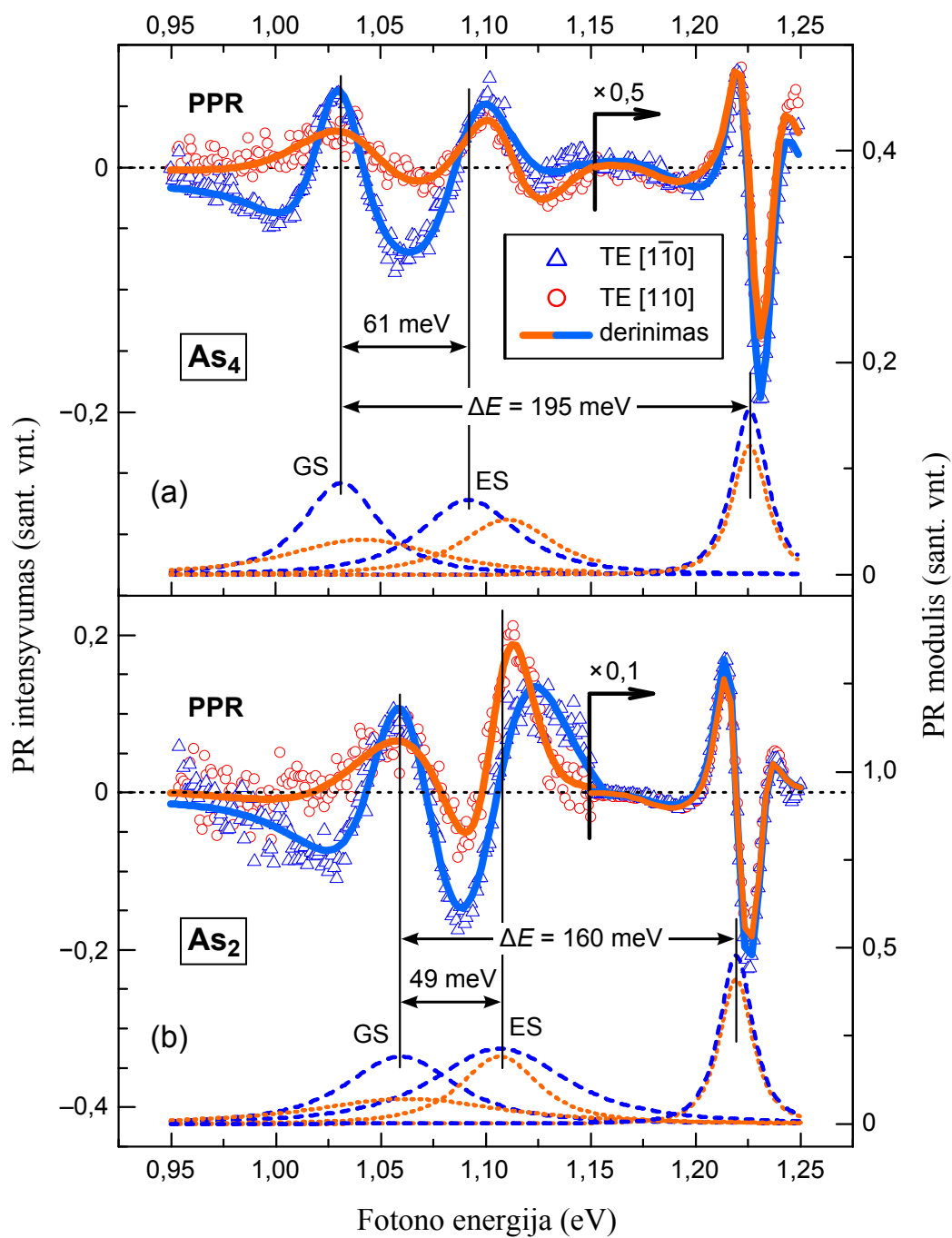
***Ginamasis teiginys***, apibendrinantis ištirtas epitaksinių InGaAs kvantinių strypelių, įterptų į InGaAs kvantinę duobę, darinių optines savybes

InGaAs kvantinių strypelių auginimas naudojant  $As_4$  šaltinį lemia didesnę fotoluminescencijos intensyvumą ir tarpjuostinių optinių šuolių energijų raudonąjį poslinkį, kurie yra sietini su stipresniu kvantiniu ribojimu dėl didesnio In kiekio kontrasto tarp InGaAs kvantinių strypelių ir juos supančios InGaAs duobės.

### 3.4 InGaAs kvantinių strypelių optinė anizotropija

InGaAs kvantinių strypelių darinių TEM mikrografijos nuo (001)-plokštumos atskleidė, kad QR forma nėra simetrinė (7 pav.): kvantinių strypelių pjūvis (001)-plokštumoje yra rombo formos, kurio ilgoji įstrižainė  $l_1$  orientuota išilgai  $[1\bar{1}0]$  kristalografinės ašies, o trumpoji įstrižainė  $l_2$  —  $[110]$  kryptimi. Be to, įstrižainių santykis  $l_1/l_2 = 1,22 \pm 0,05$  [5]. Optinės anizotropijos tyrimai, atlikti taikant tiesiškai poliarizuotą PL (PPL) ir PR (PPR) parodė, kad optinis atsakas yra iš esmės skirtingas, kai elektrinis vektorius poliarizuotas išilgai  $[1\bar{1}0]$  ir  $[110]$  kristalografinių krypčių [7.Š]. Svarbu pabrėžti, kad optinė anizotropija buvo stebėta tik optinių šuolių QR energijų srityje, kai tuo tarpu QW-srityje ši anizotropija nepasireiškia. Šis ypatumas akivaizdus QR35 darinių, augintų tiek su  $As_4$ , tiek ir su  $As_2$  šaltiniu PPR spektruose (8(a) ir (b) pav.).





8 pav. QR35 darinio PPR (simboliai) spektrai esant elektrinio vektoriaus poliarizacijai išilgai  $[1\bar{1}0]$  ir  $[110]$  krypčių, auginimui naudojant  $As_4$  (a) ir  $As_2$  (b) šaltinį. GS ir ES žymi atitinkamai tarpjuostinius optinius šuolius tarp pagrindinių ir sužadintųjų būsenų. Aiškumo dėlei vaizduojami ir PR modulio spektrai (brūkšninė linija).

**Optinės poliarizacijos laipsnis** PPL ir PPR spektruose aiškiai išreikšta optinio atsako iš (001)-plokštumos anizotropija buvo kiekybiškai aprašoma poliarizacijos laipsniu

$$P_{[001]} = \frac{I_{[1\bar{1}0]} - I_{[110]}}{I_{[1\bar{1}0]} + I_{[110]}}, \quad (1)$$

kur  $I$  žymi signalo intensyvumą išilgai tam tikros (apibrėžtos) kristalografinės krypties. Buvo nustatytas didelis ( $\approx 60\%$ ) tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių QR būsenų poliarizacijos laipsnis darinio (001)-plokštumoje (9 pav. viršutiniai spektrai). Didelė poliarizacijos laipsnio vertė iš principo negali būti aiškinama vien QR formos anizotropija (paprastai ji siekia iki 30%). Naujausi teoriniai skaičiavimai [6] rodo, kad šį ypatumą lemia skylių banginių funkcijų orientacija išilgai  $[1\bar{1}0]$  krypties.

Tiriant optinę anizotropiją iš bandinio briaunų  $[(1\bar{1}0)$ - ir  $(110)$ -plokštumos] buvo taikoma poliarizacijos laipsnio formulė

$$P = \frac{TE_{\perp-z} - TM_{\parallel-z}}{TE_{\perp-z} + TM_{\parallel-z}}, \quad (2)$$

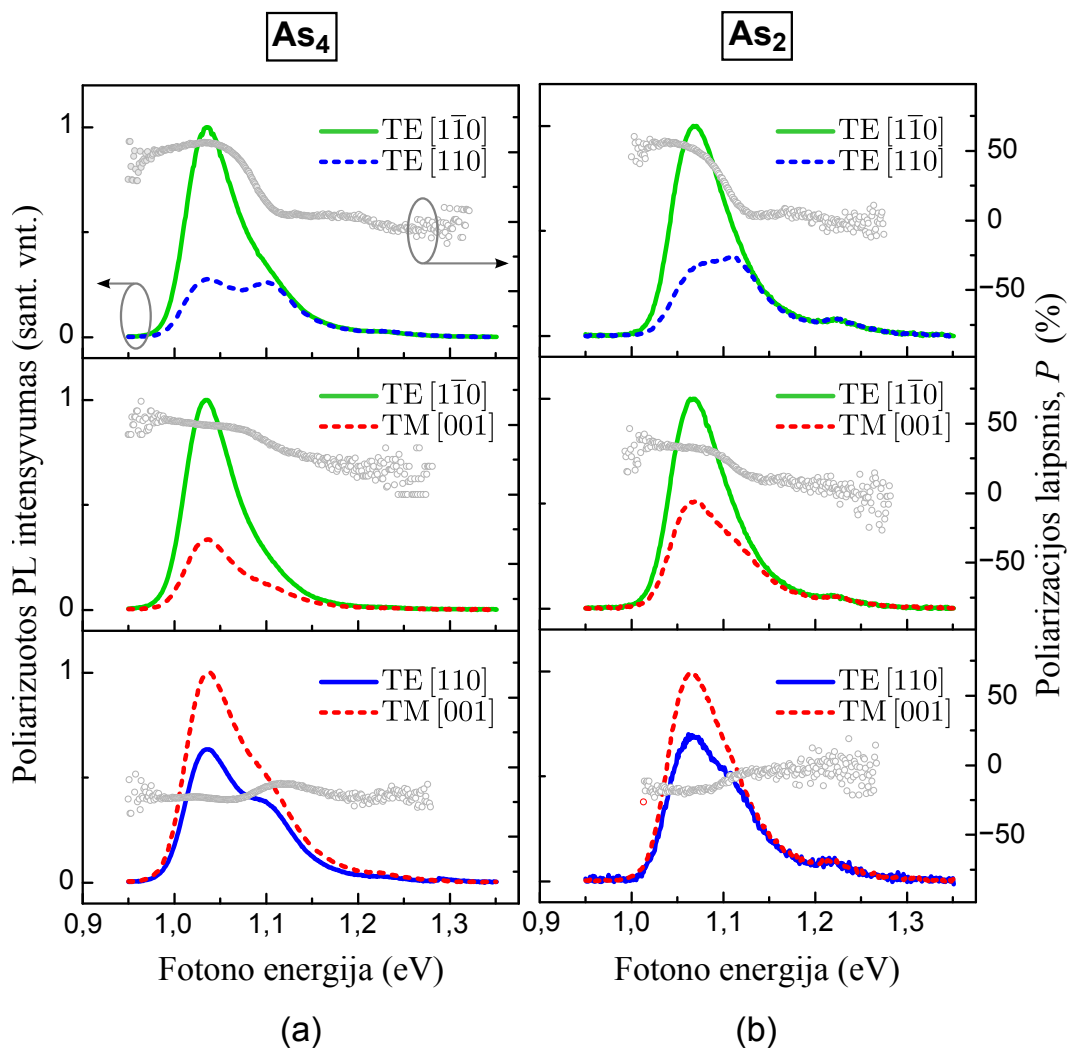
išreiškianti skersinių elektrinių (TE) ir magnetinių (TM) modų santykį. Iš 9 pav. (viduriniai ir apatiniai spektrai) matyti, kad aukštiesiems (41 nm) strypeliams  $TM_{[001]}$  modos intensyvumas yra didesnis už  $TE_{[110]}$ , bet mažesnis už  $TE_{[1\bar{1}0]}$  modos intensyvumą tiek su  $As_4$  [9 pav.(a)], tiek ir su  $As_2$  [9 pav.(b)] šaltiniu augintiems QRs. QR optinės anizotropijos PPL spektrų analizė atskleidė, kad poliarizacijos laipsnio ženklų kitimas yra sietinas su lengvųjų (LH) ir sunkiųjų (HH) skylių pajuosčių maišymusi. Išties, saviformuojančių kvantinių taškų lęšio formos geometrija (mažas aukštis-plotis santykis,  $d/2r_0 \ll 1$ ) apsprendžia, kad LH-HH skylių pajuosčių suskilimas siekia apie 100 meV, ir todėl tik optiniai šuoliai iš sunkiųjų skylių lygmenų yra stiprūs.<sup>2</sup> Kita vertus, kvantiniuose strypeliuose, kurių  $d/2r_0 \gg 1$ , LH ir HH būsenos susimaišo, todėl stipriai išauga TM modos intensyvumas.

### ***Ginamasis teiginys, apibendrinantis ištirtą InGaAs kvantinių strypelių darinių optinę anizotropiją***

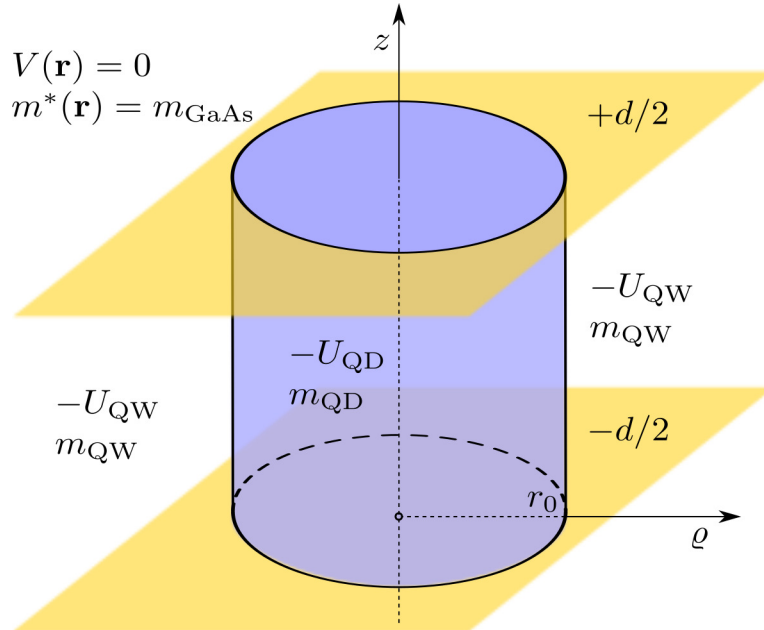
InGaAs kvantinių strypelių  $TM_{[001]}$  modos intensyvumas yra didesnis už  $TE_{[110]}$ , bet mažesnis už  $TE_{[1\bar{1}0]}$  modos intensyvumą dėl didelio ( $\approx 60\%$ ) poliarizacijos laipsnio darinio (001)-plokštumoje. Tarpjuostinių šuolių tarp pagrindinių būsenų optinė anizotropija yra susijusi su skylių banginių funkcijų orientacija išilgai  $[1\bar{1}0]$  krypties ir lengvųjų bei sunkiųjų skylių pajuosčių maišymusi.

---

<sup>2</sup>Tarpjuostinių šuolių iš sunkiųjų skylių būsenų stiprumas (tikimybė) apibrėžia TE modos intensyvumą, o iš lengvųjų skylių būsenų — TM intensyvumą [5, 6].



**9 pav.** QR35 darinio PPL spektrai esant elektrinio vektoriaus poliarizacijai išilgai  $[1\bar{1}0]$ ,  $[110]$  ir  $[001]$  kryptimis auginimui naudojant  $As_4$  (a) ir  $As_2$  (b) šaltinį. GS ir ES žymi atitinkamai tarpjuostinius optinius šuolius tarp pagrindinių ir sužadintųjų būsenų. QR anizotropija kiekybiškai įvertinta optinės poliarizacijos laipsniu  $P$ .



**10 pav.** Cilindrinio InGaAs kvantinio taško/strypelio potencinės energijos  $V(\mathbf{r}) \equiv V(z, \rho)$  ir efektinės masės  $m^*(\mathbf{r}) \equiv m^*(z, \rho)$  kitimas taško (QD), duobės (QW) ir barjero (GaAs) srityse.

## 4 Analitinis modelis cilindrinėms kvantinių taškų energijos spektro skaičiavimams

Šis skyrius — antroji originalioji disertacijos dalis.

Puslaidininkinių kvantinių nanodarinių energijos lygmenų spektras lemia nanodarinių elektromagnetinį atsaką plačioje spektrinėje THz–UV srityje ir yra esminis analizuojant kvantinių heterodarinių kaip terahercinės fotonikos elementų ir kaip optoelektroninių komponentų funkcionalumą. Kvantinių duobių energijos spektro skaičiavimai paprastai yra atliekami analitiniais gaubiančiosios funkcijos metodais [1]. Schrödingerio lygties kvantiniam taškui (QD) daugeliu atvejų analitiškai išspręsti nepavyksta, todėl modeliuojant kvantinių taškų energijos spektrą dažniausiai yra naudojami skaitmeniniai metodai. Nors skaitmeniniai skaičiavimai yra pakankamai tikslūs, pageidautini artutiniai analitiniai metodai, kurie suteiktų galimybę prognozuoti kvantinių taškų elgesį išoriniuose laukuose. Šiame darbe pateikiamas Stranski-Krastanowo (saviformuojančių) kvantinių taškų energijos spektro analitinių skaičiavimų modelis, paremtas kintamųjų atskyrimo artiniu.

Saviformuojančių Stranski-Krastanowo kvantinių taškų ir kvantinių strypelių topologija yra artima cilindrinei (10 pav.). Kadangi cilindrinės simetrijos lauke judesio kiekio momento projekcija į  $z$ -ašį yra judėjimo integralas, banginės funkcijos priklausomybė nuo azimutinio kampo  $\varphi$  yra apibrėžiama tikrinėmis judesio kiekio momento  $z$ -projekcijos operatoriaus funkcijomis, ir Schrödingerio lygtis cilindriniam QD redukuojasi

$$\hat{H} \psi(z, \varrho) = E \psi(z, \varrho), \quad (3)$$

kur hamiltonianas

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*(z, \varrho)} \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \varrho \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) - \frac{m^2}{\varrho^2} \right] + V(z, \varrho). \quad (4)$$

Kaip matyti iš (4), erdviniai kintamieji  $\varrho$  ir  $z$  yra „surišti“ efektinės masės  $m^*(z, \varrho)$  ir potencialo  $V(z, \varrho)$ . Mūsų siūlomo analitinio metodo esmė — pritaikyti kintamųjų atskyrimo artinį hamiltonianui (4). Tai leidžia pilnutinį hamiltonianą aproksimuoti dviejų nepriklausomų hamiltonianų

$$\hat{H}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z), \quad \hat{H}(\varrho) = -\frac{\hbar^2}{2m^*(\varrho)} \left[ \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left( \varrho \frac{\partial}{\partial \varrho} \right) - \frac{m^2}{\varrho^2} \right] + V(\varrho), \quad (5)$$

suma. Tuo būdu pilnutinė Schrödingerio lygtis suskyla į dvi nepriklausomas  $z$ -judėjimo ir  $\varrho$ -judėjimo lygtis, atitinkamai,

$$\hat{H}(z) Z_i(z) = \varepsilon_i Z_i(z), \quad \hat{H}(\varrho) R_{nm}(\varrho) = \varepsilon_{nm} R_{nm}(\varrho), \quad (6)$$

o šių lygčių sprendinių suma duoda QD energijos lygmenį „nuliniame“ artėjime,

$$E^{(0)} = \varepsilon_i + \varepsilon_{nm}. \quad (7)$$

Disertacijoje išsamiai aprašyto analitinio algoritmo rėmuose griežtai įrodoma, kad tikrojo ir aproksimuoto hamiltonianų skirtumas yra erdvinės  $\varrho$  ir  $z$  koordinatės rišantis operatorius

$$\hat{W}(z, \varrho) = \hat{H} - [\hat{H}(z) + \hat{H}(\varrho)], \quad (8)$$

kuris veikia tik barjerų srityse — ten, kur QD banginės funkcijos eksponentiškai gęsta. Tai fizikiniu požiūriu pateisina kintamųjų atskyrimo artinį taikymą šiame modelyje ir leidžia energijos lygmens pataisas skaičiuoti pagal perturbacijų procedūrą.

**Atrankos taisyklės** Svarbu pabrėžti, kad vienas analitinio modelio pranašumų lyginant su skaitmeniniais yra atrankos taisyklių žinojimas esant apibrėžtai simetrijai. Tuo būdu cilindrinės simetrijos kvantiniam taškui optinių šuolių atrankos taisyklės priklauso nuo krantinčios elektromagnetinės bangos poliarizacijos,

$$\circ \mathbf{E} \parallel z : \quad i' = i \pm 1, \pm 3 \dots, \quad n' = n, \quad m' = m.$$

$$\circ \mathbf{E} \perp z : \quad i' = i, \quad m' = m \pm 1.$$

Vadinasi, esant elektriniam vektoriui poliarizuotam išilgai auginimo krypties ( $\mathbf{E} \parallel z$ ) galimi elektronų tarppajuostiniai šuoliai tik tarp būsenų, kai pagrindinis kvantinis skaičius kinta per vieneta arba per tris. Kuomet elektrinis vektorius yra poliarizuotas išilgai radialinės erdvinės koordinatės ( $\mathbf{E} \perp z$ ), atrankos taisyklės leidžia tik optinius šuolius, kai azimutinis kvantinis skaičius kinta per vieneta.

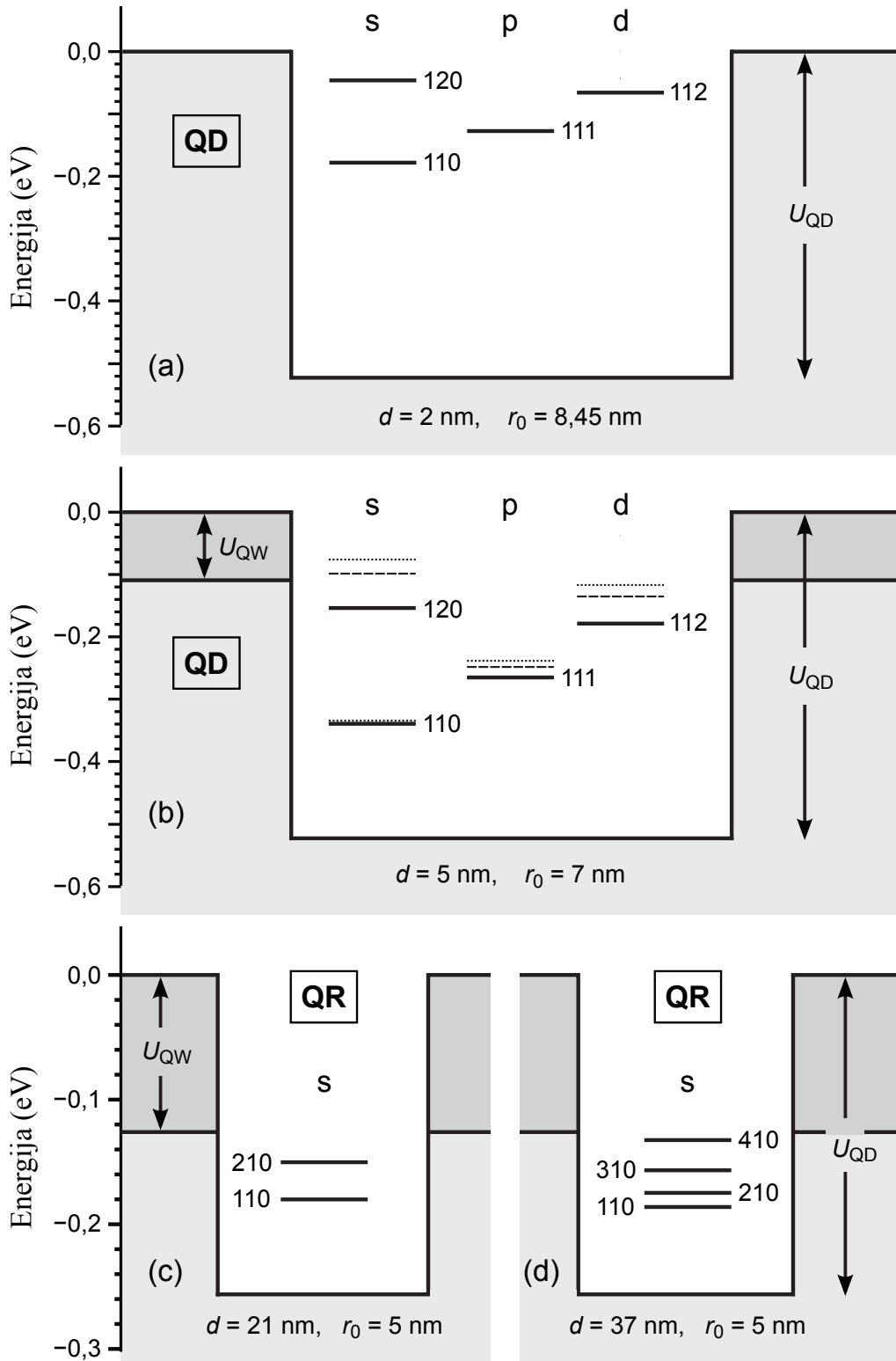
**Analitinių skaičiavimų rezultatai** Analitinis cilindrinio kvantinio taško energijos lygmenų skaičiavimo algoritmas buvo pritaikytas eksperimentiškai tirtų QD nanodarinių energijos spektro analizei. Suskaičiuoti dviejų tipų InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs matricą (bandinys #469) ir į InGaAs/GaAs (bandinys L442) kvantinę duobę, o taip pat dviejų skirtingo aukščio InGaAs kvantinių strypelių, apsuptų InGaAs sluoksniu (bandiniai L396, L397), elektronų energijos lygmenų spektrai vaizduojami, atitinkamai, 11(a–d) pav. Pateiktuose QD ir QR energijų spektruose energijos atskaitos taškas sutapatintas su laidumo juostos dugnu barjeruose (GaAs). Analitinio modeliavimo rezultatai (11(b) pav.) rodo, kad lygmenų poslinkis įskaitant sąveikos operatorių (pirmos eilės perturbaciją)  $\hat{W}(z, \varrho)$  yra mažesnis už energijų skirtumą tarp paskirų lygmenų,  $\varepsilon_{inm}^{(1)} \ll |\varepsilon_{inm}^{(0)} - \varepsilon_{i'n'm'}^{(0)}|$ . Pastaroji sąlyga pateisina algoritmo taikymą.

Skaičiuodami kvantinio strypelio ( $d = 21$  nm,  $r_0 = 5$  nm) pagrindinio lygmens banginę funkciją  $\Psi_{110}$  (12 pav.), atskleidėme įdomią fizikinę QR savybę. Pasirodo, kad banginė funkcija yra gerai lokalizuota QR srityje išilgai  $z$  krypties, kai tuo tarpu išilgai  $\varrho$  krypties ji stipriai prasiskverbia į barjerus (pobarjerinė tikimybė  $P = 20\%$ ), tačiau  $\hat{W}(z, \varrho)$  pataisa energijos lygmeniui yra labai maža ( $\varepsilon_{110}^{(1)} < 1$  meV).

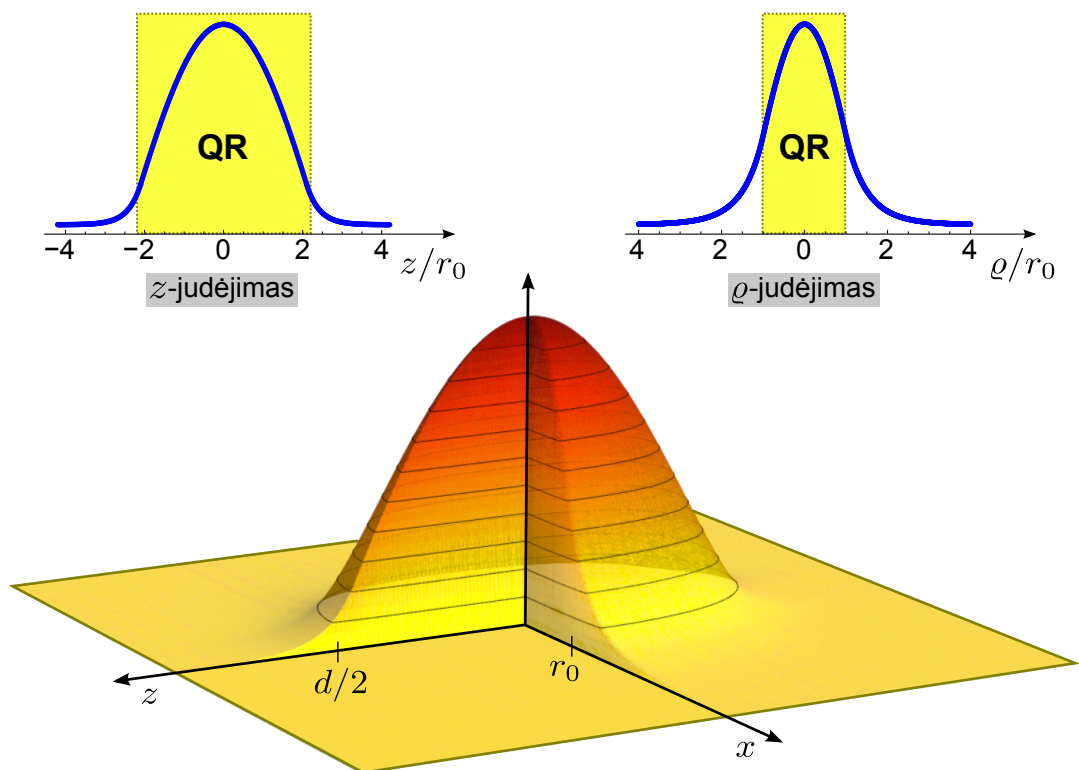
Analitinių skaičiavimų rezultatai rodo, kad pasiūlytas artutinis algoritmas yra adekvatus QD ir QR elektronų energijos spektrų skaičiavimams, be to, gerai aprašo ir pagrindinę, ir sužadintąją būsenas. Modeliavimo rezultatų palyginamieji įvertinimai atskleidė, kad analitinis modelis kokybiškai gerai dera su eksperimentiniais duomenimis.

***Ginamasis teiginys***, apibendrinantis aprašytąjį teorinį-analitinį modelį cilindrinų kvantinių taškų ir strypelių energijos spektro skaičiavimams

Pasiūlytas analitinis kvantinių taškų elektronų energijos spektro skaičiavimo metodas, paremtas kintamųjų atskyrimo artiniu. Metodas gerai aprašo spektroskopiskai tirtų InAs kvantinių taškų bei InGaAs kvantinių strypelių darinių ir pagrindinę, ir sužadintąsias būsenas.



**11 pav.** Elektronų energijos spektras  $\varepsilon_{inm}$  kvantiniam taškui (a), (b) ir strypeliui (c), (d).  $U_{QD}$  ir  $U_{QW}$  žymi kvantinio taško (strypelio) ir jį supančio InGaAs sluoksnio potencialinės duobės gylį laidumo juostos dugno GaAs atžvilgiu. Energijos lygmenys skaičiuoti neįskaitant (taškuota linija) ir įskaitant (brūkšninė linija) efektyvės masės trūkį (b). Elektronų energijos lygmenys pažymėti ištisine linija, įskaito ir sąveikos operatorių  $\hat{W}(z, \varrho)$ , ir Kane'o pataisais.



**12 pav.** Kvantinio strypelio ( $d = 21$  nm,  $r_0 = 5$  nm) pagrindinio lygmens banginė funkcija  $\Psi_{110}$  ir jos pjūviai (su paryškinta QR sritimi)  $z$ - ir  $\rho$ -judėjimo plokštumose.



# Pagrindiniai disertacijos rezultatai ir išvados

1. InAs kvantinių taškų (QD), įterptų į GaAs matricą ir į GaAs/AlAs supergardele (SL), dariniuose tarpjuostiniai optiniai šuoliai buvo tiriami moduluoto atspindžio — fotoatspindžio (PR) ir bekontakčio elektrinio atspindžio (CER) — bei fotoliuminescencijos (PL) metodais. Spektroskopinių ir skaitmeninių skaičiavimų rezultatai parodė, kad šių nanodarinių elektroninė sandara stipriai priklauso nuo InAs QD, InAs drėkinančiojo sluoksnio (WL) ir GaAs SL parametrų. Nustatyta, kad
  - a) InAs WL optinių ypatumų mėlynasis energijų poslinkis (apie 50 meV) ir intensyvumo padidėjimas, stebėti InAs/GaAs/AlAs QD-SL darinio PR/CER spektruose, yra nulemti erdvinio apribojimo efektų ir QD asimetrinės padėties GaAs/AlAs kvantinėje duobėje. Skaitmeninis modeliavimas atskleidė, kad InAs QD, įterptų į GaAs/AlAs SL, darinio tarpjuostinių optinių šuolių energiją stipriai veikia QD padėtis AlAs barjero atžvilgiu;
  - b) InAs QD optinių šuolių ypatumai ir InAs WL spektrinių linijų suskilimas, stebėtas InAs QD, įterptų į GaAs matricą ir GaAs/AlAs SL, PR/CER spektruose, yra sietinas su QD matmenų padidėjimu, koreliuojančiu su WL plonėjimu nuo 1,5 ML iki 1 ML nanodarinio auginimo kryptimi.
2. InAs QD, įterptų į GaAs/AlAs ir į sudėtinę InGaAs/GaAs/AlAs kvantinę duobę, darinių elektroninė sandara buvo tiriama PR ir PL metodais. Eksperimentinių rezultatų analizė, pasitelkiant skaitmeninį modeliavimą, parodė, kad tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių QD būsenų energija sumažėja apie 100 meV dėl įtempimus sumažinančio InGaAs sluoksnio. Nustatyta, kad
  - a) tarpjuostinių optinių šuolių tarp pagrindinių InAs QD būsenų raudonasis poslinkis yra nulemtas įtempimų sumažėjimo ir efektyvio InAs QD dydžio padidėjimo dėl In kiekio persiskirstymo tarp InAs QD ir InGaAs sluoksnio nanodarinio auginimo metu;
  - b) In kiekis  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sluoksnyje siekia  $x = 0,13$  ir yra mažesnis 2% lyginant su auginimo protokolo verte ( $x = 0,15$ ).
3. Įvairios morfologijos epitaksinių InGaAs kvantinių strypelių (QR), augintų naudojant  $\text{As}_2$  ir  $\text{As}_4$  šaltinius, optinių savybių skirtumai buvo nagrinėjami pasitelkiant PR ir PL spektroskopijas. Nustatyta, kad
  - a) InGaAs QR darinių auginimas naudojant  $\text{As}_4$  šaltinį lemia didesnį PL signalo intensyvumą, tarpjuostinių optinių šuolių energijų raudonąjį poslinkį ir didesnį energijų skirtumą tarp pagrindinio ir sužadintojo QR lygmenų;

- b) energijų skirtumas  $\Delta E$  tarp pagrindinių eksitoninių optinių šuolių InGaAs kvantiniame strypelyje ir InGaAs kvantinėje duobėje yra didesnis, kai QR auginimui naudojamas  $As_4$  šaltinis;
  - c) su  $As_4$  šaltiniu auginti InGaAs QR pasižymi geresniu krūvininkų kvantiniu ribojimu, nes  $As_4$  šaltinis lemia didesnę In kiekio kontrastą tarp InGaAs QR ir juos supančios InGaAs kvantinės duobės.
4. InGaAs QR optinė anizotropija buvo tiriama poliarizuotu PR (PPR) ir PL (PPL). Optinis atsakas buvo registruojamas iš bandinio briaunų [(1 $\bar{1}0$ )- ir (110)-plokštumos] ir paviršiaus [(001)-plokštuma]. Nustatyta, kad
- a)  $TM_{[001]}$  modos intensyvumas yra didesnis už  $TE_{[110]}$ , bet mažesnis už  $TE_{[1\bar{1}0]}$  modos intensyvumą;
  - b) tarpjuostinių optinių šuolių poliarizacijos laipsnis tarp InGaAs QR pagrindinių būsenų siekia net 60% darinio (001)-plokštumoje;
  - c) QR darinių optinė anizotropija yra nulemta skylių banginių funkcijų orientacijos išilgai [1 $\bar{1}0$ ] krypties ir lengvųjų bei sunkiųjų skylių pajuosčių maišymosi.
5. Pasiūlytas analitinis cilindro formos QD/QR elektronų energijos spektro skaičiavimo metodas, paremtas kintamųjų atskyrimo artiniu. Parodyta, kad
- a) pertubacijos operatorių  $\hat{W}(z, \varrho)$  sudarantys kinetinės ir potencinės energijų nariai yra lygiareikšmiai, o pati perturbacija  $\hat{W}(z, \varrho)$  veikia tik barjerų srityse, kurias tepasiekia elektrono banginių funkcijų gėstančios „uodegos“;
  - b) modelis gerai aprašo spektroskopiškai tirtų InGaAs QD darinių ir pagrindinę, ir sužadintąsias būsenas;
  - c) suskaičiuotas InGaAs QD darinių elektronų energijos spektras kokybiškai gerai aprašo tarppajuostinių optinių šuolių energijas, nustatytas eksperimentiškai.

## Pagrindinė literatūra

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, *Quantum dot heterostructures* (Wiley, Chichester, 1999).
- [2] V. Karpus, *Dvimačiai elektronai* (Ciklonas, Vilnius, 2004).
- [3] L. Rebohle, F. F. Schrey, S. Hofer, G. Strasser, and K. Unterrainer, *Energy level engineering in InAs quantum dot stacks embedded in AlAs/GaAs superlattices*. Physica E **17**, 42 (2003).
- [4] A. Barve, J. Shao, Y. D. Sharma, T. E. Vandervelde, K. Sankalp, S. J. Lee, S. K. Noh, and S. Krishna, *Resonant Tunneling Barriers in Quantum Dots-in-a-Well Infrared Photodetectors*. IEEE J. Quantum Electron. **46** (7), 1105 (2010).

- [5] L. H. Li, G. Patriarche, M. Rossetti, and A. Fiore, *Growth and characterization of InAs columnar quantum dots on GaAs substrate*. J. Appl. Phys. **102**, 033502 (2007).
- [6] M. Usman, T. Inoue, Y. Harda, G. Klimeck, and T. Kita, *Experimental and atomistic theoretical study of degree of polarization from multilayer InAs/GaAs quantum dot stacks*. Phys. Rev. B **84**, 115321 (2011).
- [7] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, *Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys*. J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).

## Summary

Epitaxial InGaAs quantum dot (QD) structures is the topic of this doctoral dissertation. The QD structures are studied using modulated reflectance and photoluminescence spectroscopy techniques. Such nanostructures are the key-ingredients in many novel photonics devices, operating in infrared and terahertz spectral range. Hence, a comprehensive knowledge of optical properties and electronic energy spectrum of these QD structures is essential in order to define their optimal design parameters and favorable growth conditions.

The doctoral thesis is organized as follows. Motivation, main aims of the work, scientific novelty, statements for defence and list of publications together with a list of conference reports are given in the **Introduction**. Then, **Chapter 1** presents the principles and examples of modulation spectroscopy, a very sensitive tool for optical characterization, followed by a brief introduction to molecular beam epitaxy and Stranski-Krastanow self-assembling growth mode for realization of QD nanostructures. Moreover, an extensive literature overview, regarding main achievements of QD-based nanostructures investigated, can be found here. In **Chapter 2**, details of QD samples studied with the relevant structure schemes, bandstructure diagrams, growth protocols and TEM images followed by experimental set-up of spectroscopic techniques employed are given. **Chapters 3** and **4** covers original results of the dissertation. In particular, **Chapter 3** contains comprehensive investigation of electronic structure and optical properties of InAs/GaAs/AlAs dots-in-a-superlattice, InAs/InGaAs/GaAs/AlAs dots-in-a-well and InGaAs quantum rod (QR) structures. Moreover, an intriguing optical anisotropy properties of InGaAs QRs are revealed and discussed therein. **Chapter 4** is devoted to original analytical approach, based upon variable separation approximation, for energy spectrum calculations of cylindrical self-assembling QDs and QRs. Finally, **Chapter 5** underlines the main results and presents conclusions of the work.

## Apie autorių

Ramūnas Nedzinskas gimė 1982 m. lapkričio 30 d. Joniškyje (Joniškio raj.). 2001 m. baigė Vilniaus Fabijoniškių (buvusi 64-oji) vidurinę mokyklą. Tais pačiais metais įstojo į Vilniaus universiteto Fizikos fakultetą, kur 2001–2005 m. studijavo Kompiuterinės fizikos programą. Paruošė bakalauro studijų baigiamąjį darbą „Plokščios monochromatinės elektromagnetinės bangos sklaida daugiasluoksniu dielektriniu cilindru“, vadovas dr. Juozas Bučinskas. Tęsė magistrantūros studijas Vilniaus universiteto Fizikos fakultete, kur 2005–2007 m. studijavo Medžiagotyros ir puslaidininkų fizikos programą. Paruošė fizikos magistro baigiamąjį darbą „InAs kvantinių taškų, įterptų į GaAs/AlGaAs supergardeles, energijos spektro tyrimas“, vadovas dr. (*hp*) Gintaras Valušis. Nuo 2006-ųjų dirba Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkų fizikos instituto Terahercinės fotonikos ir Puslaidininkų optikos laboratorijose jaunesnioju mokslo darbuotoju. Fizinių ir technologijos mokslų centro Puslaidininkų fizikos instituto doktorantūroje studijavo 2007–2011 m.

**Stipendijos, stažuotės** Europos fizikų draugijos stipendininkas. 2005–2006 m. 5 mėn. stažavosi Vienos technologijos universiteto (Technische Universität Wien; Viena, Austrija) Kietojo kūno elektronikos instituto (Institut für Festkörperelektronik) prof. Gottfried Strasser grupėje. Vykde tyrimus pagal temą „Mikrodisko formos puslaidininkinis kvantų kaskadų lazeris, veikiantis teraherciniame (THz) spektro ruože“ (“Microdisk quantum cascade laser emitting in the THz spectral range”).

2010–2011 m. 5 mėn. stažavosi Goethe universiteto (Frankfurtas prie Maino, Vokietija) Fizikos fakulteto prof. Hartmut Roskos grupėje. Stažuotės metu dirbo moksliniu bendradarbiu ir vykdė tyrimus pagal temą „Tiesioginis koherentinių THz bangų generavimas puslaidininkiniu lazeriu, pagrįstu artimosios infraraudonosios šviesos maišymu“ (“Direct THz-wave generation in a dual-color near-IR semiconductor laser”).

**Kitas rimtumo pusrutulis** Disertacijoje pasakoju apie elektronų nelaisvę, jų gyvenimo įpročius nano-nameliuose, polėkį (optinius šuolius), laisvės troškimą (tuneliavimą pro barjerą). Manau, tikslųjų mokslų atstovams svarbu lavinti/išsaugoti vaizduotę, mokytis užsienio kalbų, piešti (pvz., kaire ranka), skaityti ir pačiam kurti pasakas, o kai kurias jų išmokti atmintinai. Aš laisvės pojūtį išgyvenu kaskart mindamas dviratį (po atviru dangumi).

El. paštas: ramunas@pfi.lt