原子論モデルを用いた乱れた量子ドットのエネルギー分布解析

Atomistic Modeling of Energy Distribution of Disordered Quantum Dots

阪大工 ○(M2) Lim Jin Hyong, 森 伸也

Osaka Univ., ◦Jin Hyong Lim, Nobuya Mori

E-mail: {lim, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

コロイダル量子ドット光検出器など，量子ドットを利用した光デバイスが注目されている．量子ドットは作製時にサイズや形状にばらつきが生じる．そのようなばらつきが，どのように量子ドットのエネルギー準位ばらつきに影響を及ぼすかを解析することは重要である．本研究では，原子論モデルを用いて，量子ドットのエネルギー準位を計算することにより，量子ドットのサイズ・形状ばらつきが量子ドットのエネルギー分布に及ぼす影響を調べることを目的とした．

量子ドットのエネルギー準位は $sp^3s^*d^5$ 経験的強束縛近似法 [1] を用いて計算した．量子ドットの形状や界面ラフネスなどを変化させ，禁止帯幅などを計算した．

Fig. 1 に立方八面体構造 InP 量子ドットの禁止帯幅の直径 D 依存性を示す. 禁止帯幅は, $D^{-1.19}$ に従って変化することがわかった．作製時の量子ドットのサイズばらつきが中心直径 6.6 nm，半値幅 1 nm のガウス分布に従うと仮定した場合の量子ドットの禁止帯幅分布を Fig. 2 に示す．禁止帯幅の分布は，単純なガウス分布ではなく歪度を持っていることがわかる．量子ドットにおける励起子拡散シミュレーションをなどを行う際，このような量子ドットのエネルギー分布を考慮する必要がある．本研究では，他の量子ドット構造・半導体材料や，界面ラフネスの影響などについても計算した．

[1] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, Phys. Rev. B, **57**, 6493 (1998).

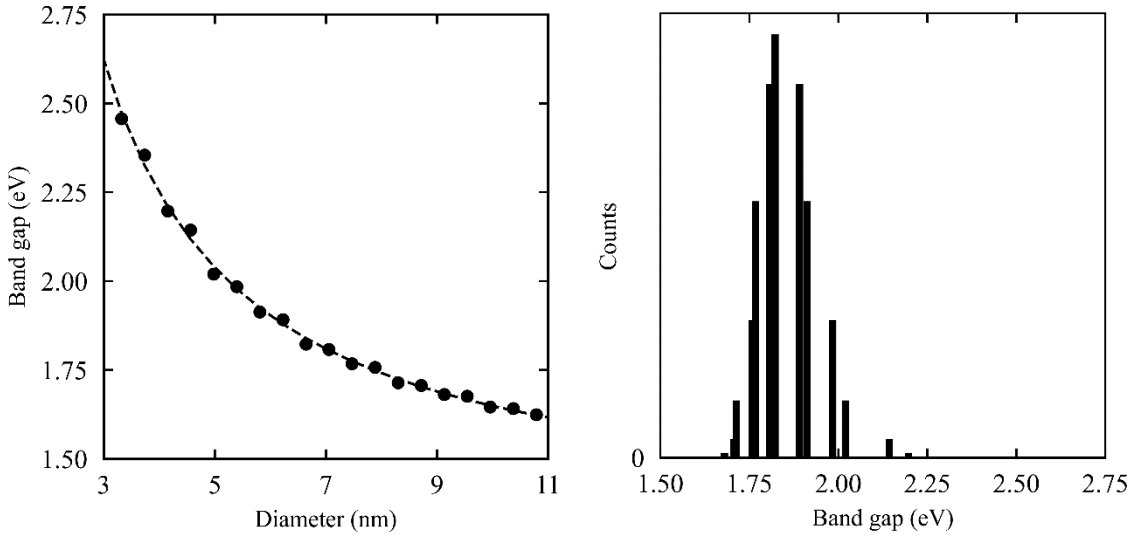

Fig. 1: [left] Band gap energy as a function of the diameter of InP quantum dots (QDs). Solid circles: calculated band gap of QDs by the tight-binding method; dash line: fit to the calculated band gaps. Fig. 2: Relative counts as a function of the band gap of QDs.

© 2021年 応用物理学会