

Streszczenie

Kropki kwantowe definiowane fazą krystaliczną są zbudowane z segmentów drutu kwantowego tego samego materiału półprzewodnikowego, lecz występującego w różnych fazach krystalicznych, takich jak blenda cynkowa i wurcyt. Ze względu na swoje wyjątkowe właściwości elektronowe i optyczne mogą one w przyszłości znaleźć potencjalne zastosowanie w wielu dziedzinach techniki, takich jak fotonika, optyka kwantowa oraz informatyka kwantowa. W niniejszej rozprawie zastosowano wielociałowe podejście atomistyczne do badania właściwości ekscytonowych kropek kwantowych definiowanych fazą krystaliczną z fosforu indu.

Pokazaliśmy, że w systemach tych, może występować nietypowy stan podstawowy dziury o charakterze antywiążącym. Ponadto wykazaliśmy, że nawet relatywnie niewielkie odkształcenia spowodowane niedopasowaniem sieci wurcytu i blendy cynkowej, które często są pomijane w obliczeniach, mogą znacząco wpłynąć na strukturę stanów dziurowych, powodując m.in. pojawienie się charakterystycznej struktury podwójnego piku w ekscytonowych widmach optycznych. Wyniki naszych badań pokazują również, że efekty związane z występowaniem pola krystalicznego w fazie wurcytu oraz spontaniczna polaryzacja pojawiająca się na skutek różnic pomiędzy fazami krystalicznymi, znacząco wpływają na właściwości najniższych stanów dziurowych, a w konsekwencji na ekscytonowe widma optyczne. Ponadto podkreślamy, że dokładne modelowanie tego typu kropek kwantowych musi uwzględniać oddziaływanie elektronowo-dziurowe na odpowiednio wczesnym etapie obliczeń, a istotnym problemem jest nieokreśloność parametrów materiałowych dla InP w fazie wurcytu.

Abstract

Crystal phase quantum dots are formed by segments of a quantum wire made of the same semiconductor material but in different crystal phases, such as zinc-blende and wurtzite. Due to their unique electronic and optical properties, they may find potential applications in various areas of technology in the future, such as photonics, quantum optics, and quantum computing. This dissertation employs an atomistic many-body approach to investigate the excitonic properties of InP crystal phase quantum dots.

We have shown that such systems can exhibit a rare antibonding hole ground state. Furthermore, we demonstrated that even relatively small strains due to the wurtzite/zinc-blende lattice mismatch, which is often neglected in calculations, can significantly affect the hole state structure, leading to, among others, the appearance of characteristic double-peak features in the excitonic optical spectra. The results of our research also show that the splitting of the crystal field in the wurtzite phase and the spontaneous polarization originating from the phase interfaces significantly influence the properties of the lowest hole states and, consequently, the excitonic optical spectra. Additionally, we emphasize that accurate modeling of these quantum dots must incorporate electron-hole interaction at an appropriately early stage of calculations, whereas the indeterminacy of material parameters for InP in the wurtzite phase is a significant problem.