

Р.М. ПЕЛЕЩАК, Н.Я. КУЛИК

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. Івана Франка  
(Вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100; e-mail: delenkonadia@mail.ru)

## ВПЛИВ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНИХ ЕФЕКТІВ НА ЕЛЕКТРОННУ СТРУКТУРУ КВАНТОВИХ ТОЧОК У НАПРУЖЕНИХ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

УДК 538.915+539.3

*В межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі побудовано теорію формування зонного профілю квантуючого потенціалу та енергетичних рівнів електрона та дірки у напруженій наногетеросистемі з когерентно-напруженими квантовими точками залежно від ступеня легування  $n$  матриці наногетеросистеми та їх поверхневої густини. Показано, що характер квантуючого потенціалу наногетеросистеми визначається не тільки механічною складовою електрон-деформаційного потенціалу, а також енергією електростатичної взаємодії зарядів в околі межі квантова точка – матриця, що приводять до утворення додаткових квазітрикутних бар'єрів та квазітрикутних потенціальних ям поблизу межі квантова точка – матриця.*

*Ключові слова:* квантові точки, деформація, електрон-деформаційний потенціал.

### 1. Вступ

Інтенсивні дослідження квазінульвимірних напівпровідникових структур стимулюються як відкриттям низки принципово нових фундаментальних явищ, так і наявністю великих прикладних можливостей [1–3]. Квазінульвимірні структури (квантові точки – КТ) розмірами  $a \sim 1 - 10^2$  нм характеризуються просторовим обмеженням носіїв заряду у всіх трьох напрямках простору [4] та виникненням ефекту розмірного квантування енергетичного спектра, за якого модифікація електронних властивостей матеріалів найбільш виражена. Дискретність енергетичного спектра електронів і дірок у КТ використовується для створення оптичних нанолазерів та інших приладів з високою температурною стабільністю частоти генерації.

Оптичні та електронні властивості квазінульвимірних структур значною мірою визначаються енергетичним спектром просторово обмежених електронів і дірок, який був розрахований як без

врахування механічної складової деформації [5, 6], так і з врахуванням її [7–11] у межах прямокутного квантуючого потенціалу. У побудованих моделях враховано вплив самоузгодженої деформації кристалічної матриці і КТ, лапласівського тиску на межі КТ – матриця, скінченність розмірів оточуючої матриці та залежність параметра невідповідності контактуючих ґраток на гетеромежі від розмірів КТ та матриці. Однак, в цих роботах не враховано вплив електрон-деформаційної взаємодії. Таким чином, виникає необхідність побудови нової теоретичної моделі напруженої наногетероструктури з КТ, яка б враховувала перенормування енергетичного спектра квантової точки під впливом самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії [12].

Оскільки різниця параметрів ґраток InAs і GaAs значна, зокрема у наногетеросистемі InAs/GaAs(001) з масивом КТ (InAs) неузгодження параметрів кристалічних ґраток становить  $f = 7\%$ , а для CdTe/ZnTe –  $4\%$ , то механічні напруження, що виникають у гетеросистемі з КТ, істотно впливають на структуру дозволених зон та

© Р.М. ПЕЛЕЩАК, Н.Я. КУЛИК, 2014

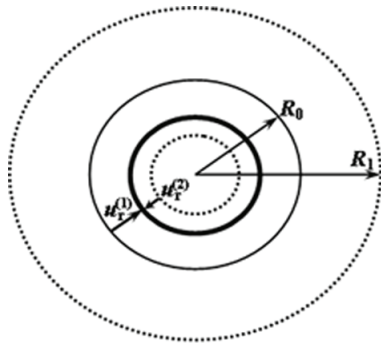


Рис. 1. Модель напруженої квантової точки сферичної симетрії

на їх розрив. У випадку когерентно-напружених КТ за наявності в їх околі полів пружних неоднорідних напружень і самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку крім механічної складової параметра деформації виникає додатково електрон-деформаційна її складова, яка суттєво проявляється у формуванні квантуючого потенціалу при значних концентраціях електронів провідності ( $n_0 \leq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) в матриці наногетеросистеми, що в кінцевому приводить до зміни положення енергетичних рівнів, локалізованих у квантовій точці. Тому для прогнозованого керування спектральними характеристиками нанооптоелектронних приладів на основі напружених наногетеросистем з КТ (InAs/GaAs з КТ (InAs) та CdTe/ZnTe з КТ (CdTe)) необхідно знати закономірність зміни електронної структури квантової точки (КТ) в залежності від її розміру  $R_0$ , середньої концентрації електронів провідності  $n_0$  в матриці наногетеросистеми та поверхневої густини квантових точок  $N_{\text{QD}}$ . Таким чином, за допомогою електрон-деформаційних параметрів, а саме: концентрації електронів провідності  $n_0$ , деформаційних потенціалів зони провідності та валентної зони та технологічних параметрів (поверхневої густини квантових точок  $N_{\text{QD}}$ ) можна перебудувати частоту рекомбінаційного випромінювання при переході електрона з локалізованого електронного рівня на дірковий в КТ. У зв'язку з цим стає актуальною задача про вплив самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії на електронну структуру КТ у напружених наногетероструктурах.

Метою даної роботи є розрахунок, в межах моделі самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку, спектра носіїв заряду в КТ, перенормо-

ваного як електрон-деформаційним, так і електростатичним потенціалами при різних значеннях концентрації електронів провідності  $n_0$  в матриці наногетеросистеми та поверхневої густини  $N_{\text{QD}}$  квантових точок.

## 2. Модель напруженої наногетеросистеми з квантовими точками сферичної симетрії

У даній роботі розглядаються наногетеросистеми InAs/GaAs (CdTe/ZnTe) з напруженими впорядкованими квантовими точками, які не мають чіткої вираженої кристалографічної огранки, зокрема, квантові точки, форма яких наближено відображає сферичну симетрію. Наприклад, в гетеросистемі InAs/GaAs (001) такі КТ будуть формуватися при товщині нарощуваного шару InAs порядку двох моношарів [13, 14]. Тому в подальшому внеском ребер острівця в енергію пружної релаксації нехтуємо.

Впорядковане розміщення напружених квантових точок у кристалічній матриці зумовлене пружною взаємодією між острівцями, яка виникає за рахунок неузгодження параметрів ґраток InAs/GaAs. Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з однією КТ, зроблено таке наближення: енергія попарної пружної взаємодії КТ замінена енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації  $\sigma_{\text{ef}} (N - 1)$  всіх інших КТ.

Оскільки постійна ґратки ( $a_1 = 6,08 \text{ \AA}$ ) нарощуваного матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs ( $a_2 = 5,65 \text{ \AA}$ ), то при гетероепітаксійному нарощуванні в межах псевдоморфного росту InAs на шар GaAs, матеріал InAs зазнає деформації стиску, а GaAs – розтягу. Формування напруженої сферичної наногетеросистеми здійснюється таким чином: сферична квантова точка радіусом  $R_0$  представляється пружним дилатаційним мікровключенням у вигляді пружної сфери (суцільна тонка лінія на рис. 1), поміщеним у сферичну порожнину у матриці GaAs (пунктирна лінія на рис. 1), об'єм якої менший від об'єму мікровключення на  $\Delta V$ . Щоб вкласти таке сферичне мікровключення, необхідно його стиснути ( $u_r^{(1)}$  ( $u_r^{(1)}$  – радіальна компонента вектора механічного зміщення в матеріалі КТ) і розтягнути ( $u_r^{(2)}$  ( $u_r^{(2)}$  – радіальна компонента вектора механічного зміщення в матеріалі матриці) оточуючу матрицю GaAs в радіальних напрям-

ках. Результат одночасної дії деформацій контактуючих наноматеріалів описується зміною об'єму  $\Delta V = f4\pi R_0^3$  через параметр невідповідності ґраток контактуючих матеріалів  $f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%$ .

Під впливом неоднорідної деформації стиску матеріалу КТ InAs(CdTe) та неоднорідної деформації розтягу матеріалу матриці наногетеросистеми GaAs (ZnTe) локально змінюється зонна структура напруженої наногетеросистеми з КТ. Така зміна, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку, приводить до перерозподілу електронів в околі напруженої межі квантова точка – матриця, а це, в свою чергу, до виникнення неоднорідного електростатичного потенціалу як в механічно напруженій КТ, так і в матриці, тобто до виникнення  $n^+ - n$ -переходу (електрон-деформаційного диполя  $\mathbf{P}_{\text{el.-def.}}$ ) [15].

### 3. Профіль та глибина квантуючого потенціалу напруженої наногетеросистеми з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії

Профіль та глибина потенціальної ями для електрона в напруженій наногетеросистемі з КТ із врахуванням внесків електростатичної енергії  $-e\phi^{(i)}(r)$  та енергії, зумовленої як механічною  $\varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)}(r)$ , так і електрон-деформаційною  $\varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r)$  складовими деформацій матеріалів КТ та матриці описується таким співвідношенням:

$$\begin{aligned} \Delta V_c(r) = & \Delta E_c(0) + a_c^{(2)}(\varepsilon_{\text{mech.}}^{(2)}(r) + \\ & + \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(2)}(r)) - a_c^{(1)}(\varepsilon_{\text{mech.}}^{(1)}(r) + \\ & + \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(1)}(r)) - e(\phi^{(2)}(r) - \phi^{(1)}(r)), \end{aligned} \quad (1)$$

$$i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs}, & 0 \leq r \leq R_0, \\ 2 \equiv \text{GaAs}, & R_0 \leq r \leq R_1, \end{cases}$$

де  $R_0$  – радіус квантової точки,  $R_1$  – радіус матриці,  $\Delta E_c(0)$  – глибина потенціальної ями для електрона в КТ InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs,  $a_c^{(1)}$ ,  $a_c^{(2)}$  – гідростатичні константи деформаційного потенціалу зони провідності в матеріалах квантової точки і матриці відповідно.

Параметр деформації  $i$ -го матеріалу наногетероструктури

$$\varepsilon^{(i)}(r) = \text{Sp} \varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)}(r) + \text{Sp} \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r),$$

де

$$\text{Sp} \varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)}(r) = \varepsilon_{rr\text{mech.}}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech.}}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta\text{mech.}}^{(i)},$$

та визначається через зміщення атомів  $u_r^{(i)}$ , які знаходяться з рівняння рівноваги, яке у випадку сферичної симетрії має вигляд:

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2} u_r^{(i)} = D^{(i)} e \frac{d\phi^{(i)}(r)}{dr} \quad (2)$$

з такими граничними умовами [11, 16, 17]:

$$\begin{cases} 4\pi R_0^2 (u_r^{(2)}|_{r=R_0} - u_r^{(1)}|_{r=R_0}) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} - P_L, \quad P_L = \frac{2\alpha}{R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}(N-1) \end{cases} \quad (3)$$

(ліва частина першого з рівнянь системи (3) дорівнює геометричній різниці  $\Delta V$  об'ємів мікрвоклучення та порожнини в матриці GaAs, зображених на рис. 1),

$$D^{(i)} = \frac{(1 + \nu_i)(1 - 2\nu_i)}{(a_i)^3 E_i(1 - \nu_i)},$$

$u_r^{(i)}$  – радіальна компонента зміщення атомів у  $i$ -му напівпровідниковому матеріалі,  $a_i$  – параметр ґратки  $i$ -го матеріалу наногетероструктури,  $\nu_i$ ,  $E_i$  – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці,  $e$  – заряд електрона,  $P_L$  – лапласівський тиск,  $\alpha$  – поверхнева енергія КТ (InAs),  $f$  – параметр невідповідності ґраток контактуючих матеріалів,  $\sigma_{rr}^{(i)}$  – радіальні складові тензора механічного напруження  $i$ -го матеріалу [18].

Загальний розв'язок неоднорідного рівняння (2) представляється у вигляді суми механічної та електрон-деформаційної складових зміщень:

$$u_r^{(i)}(r) = u_{r\text{mech.}}^{(i)}(r) + u_{\text{rel.-def.}}^{(i)}(r) \quad (4)$$

$$u_{r\text{mech.}}^{(i)}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}$$

$$u_{\text{rel.-def.}}^{(i)}(r) = \frac{D^{(i)}e}{r^2} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' \quad (5)$$

Поле механічних зміщень визначають такі компоненти тензора механічних деформації матеріалів КТ і оточуючої матриці:

$$\varepsilon_{rr\text{mech.}}^{(1)} = \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech.}}^{(1)} = \varepsilon_{\theta\theta\text{mech.}}^{(1)} = C_1^{(1)} \quad (6)$$

$$\varepsilon_{rr\text{mech.}}^{(2)} = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \quad (7)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech.}}^{(2)} = \varepsilon_{\theta\theta\text{mech.}}^{(2)} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3}.$$

Коефіцієнти  $C_1^{(1)}$ ,  $C_1^{(2)}$ ,  $C_2^{(2)}$  знаходяться з розв'язку системи (3) з врахуванням виразів (4)–(7), (12) та виразів для електростатичного потенціалу  $\phi^{(i)}(r)$  (20), (21).

Механічна складова всебічної деформації:

$$\varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)} = \varepsilon_{rr\text{mech.}}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi\text{mech.}}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta\text{mech.}}^{(i)} = 3C_1^{(i)}. \quad (8)$$

Поле електрон-деформаційних зміщень описується такими компонентами тензора електронних деформацій:

$$\varepsilon_{r\text{rel.-def.}}^{(i)} = D^{(i)}e \left( \frac{2}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' - \phi^{(i)}(r') \right), \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\varphi\varphi\text{el.-def.}}^{(i)} &= \varepsilon_{\theta\theta\text{el.-def.}}^{(i)} = \\ &= D^{(i)}e \left( \frac{1}{r^3} \int r'^2 \phi^{(i)}(r') dr' \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Електрон-деформаційна складова всебічної деформації:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)} &= \varepsilon_{r\text{rel.-def.}}^{(i)} + \varepsilon_{\varphi\varphi\text{el.-def.}}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta\text{el.-def.}}^{(i)} = \\ &= D^{(i)}e \phi^{(i)}(r). \end{aligned} \quad (11)$$

Механічні напруження  $\sigma_{rr}^{(1)}$  та  $\sigma_{rr}^{(2)}$  в матеріалах квантової точки та матриці дорівнюють:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^{(i)} &= \frac{E_i}{(1 + \nu_i)(1 - 2\nu_i)} \times \\ &\times \left[ (1 - \nu_i) \varepsilon_{rr}^{(i)} + \nu_i \left( \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)} + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Потенціал  $\phi^{(i)}(r)$  знаходиться з рівняння Пуассона:

$$\Delta \phi^{(i)}(r) = \frac{e}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} \Delta n^{(i)}(r), \quad (13)$$

де  $\varepsilon_d^{(i)}$  – відносна діелектрична проникність  $i$ -го матеріалу наногетеросистеми,  $\Delta n^{(i)}(r) = n^{(i)}(r) - n_0$  – зміна електронної густини в околі гетеро-межі квантова точка–матриця, яка визначається через суперпозицію добутку хвильових функцій:

$$n^{(i)}(r) = \sum_n \frac{\psi_n^{*(i)}(r) \psi_n^{(i)}(r)}{\exp(\beta(\tilde{E}_n - \mu_i)) + 1}, \quad (14)$$

які знаходяться з рівняння Шредінгера (15):

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^{*(i)}} \Delta_r + \Delta V_c(r) \right] \psi_n^{(i)}(r) = E_n \psi_n^{(i)}(r) \quad (15)$$

з такими граничними умовами:

$$\begin{cases} R_{nl}^{(1)}(r)|_{r=R_0} = R_{nl}^{(2)}(r)|_{r=R_0}, \\ \frac{1}{m^{*(1)}} \frac{dR_{nl}^{(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \frac{1}{m^{*(2)}} \frac{dR_{nl}^{(2)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \end{cases} \quad (16)$$

де  $m^{*(i)}$  – ефективна маса електрона в  $i$ -му матеріалі,  $E_n$  – енергія електрона на  $n$ -рівні в квантовій ямі,  $\Delta V_c(r)$  – потенціальна енергія електрона (1),  $n_0$ ,  $n^{(i)}(r)$  – середня концентрація електронів провідності та концентрація носіїв заряду в напруженій наногетероструктурі з КТ,  $\mu_i$  – хімічний потенціал  $i$ -го матеріалу наногетероструктури, що визначається з рівняння:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int n(r) dr = n_0, \quad (17)$$

де  $\Omega_0$  – об'єм елементарної комірки.

Розв'язок рівняння Шредінгера (15) в сферичній системі координат шукаємо у вигляді:

$$\psi_{nlm}^{(i)}(r, \theta, \phi) = R_{nl}^{(i)}(r) Y_{lm}^{(i)}(\theta, \phi),$$

де  $Y_{lm}^{(i)}(\theta, \phi)$  – сферичні функції Лежандра.

Рівняння Пуассона (13), для сферичної симетрії запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2 \phi^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\phi^{(i)}}{dr} = \frac{e}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} (n^{(i)}(r) - n_0). \quad (18)$$

Розподіл концентрації носіїв заряду  $n^{(i)}(r)$  при  $T = 0$  в квантовій точці та матриці знаходиться за формулою:

$$n^{(i)}(r) \approx \left| \psi_{nlm}^{(i)} \right|_{a_i}^2 \frac{N_{\text{QD}}}{a_i} \times \left[ \text{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \right.$$

$$+ \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}(\mu - E_1 - \lambda_0^{(i)} - a_c^{(i)} \varepsilon_{rr}^{(i)})\right) + \sqrt{\frac{8}{\pi}} \frac{e}{\Delta E} e^{-\frac{2(\mu - E_1 - \lambda_0^{(i)} - a_c^{(i)} \varepsilon_{rr}^{(i)})^2}{\Delta E^2}} e\phi^{(i)}(r), \quad (19)$$

де  $N_{\text{QD}}$  – поверхнева густина квантових точок,  $\Delta E$  – півширина гаусівської лінії,  $E_1$  – енергія електрона на першому локалізованому рівні в квантовій ямі.

Розв'язок рівняння Пуассона (18) в квантовій точці та матриці, з врахуванням виразу для концентрації електронів (19) знаходився з усередненою густиною імовірності  $|\bar{\psi}^{(i)}|^2$  і має такий вигляд:

$$\phi^{(1)}(r) = A_1 \frac{\sinh\left(\sqrt{\frac{1}{a_1}} r\right)}{r} - a_1 b_1, \quad 0 \leq r \leq R_0, \quad (20)$$

$$\phi^{(2)}(r) = B_1 \frac{\exp\left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right)}{r} + B_2 \frac{\exp\left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right)}{r} - a_2 b_2 - \frac{d_2}{2r} \left[ \exp\left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right) E_i\left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right) + \exp\left(\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right) E_i\left(-\sqrt{\frac{1}{a_2}} r\right) \right], \quad R_0 \leq r \leq R_1 \quad (21)$$

де

$$E_i(z) = - \int_{-z}^{\infty} t^{-1} \exp(-t) dt, \\ \frac{1}{a_1} = \frac{e^2}{\varepsilon_d^{(1)} \varepsilon_0 a_1} \left| \bar{\psi}^{(1)} \right|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times \exp\left(\frac{-2(\mu - E_1 - \lambda_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)})^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$\frac{1}{a_2} = \frac{e^2}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a_2} \left| \bar{\psi}^{(2)} \right|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times \exp\left(\frac{-2(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)})^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$d_2 = \frac{2a_c^{(2)} C_2^{(2)} e}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a_2} \left| \bar{\psi}^{(2)} \right|^2 N_{\text{QD}} \frac{\sqrt{\frac{8}{\pi}}}{\Delta E} \times \exp\left(\frac{-2(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)})^2}{\Delta E^2}\right),$$

$$b_1 = \frac{e}{\varepsilon_d^{(1)} \varepsilon_0 a_1} \left| \bar{\psi}^{(1)} \right|^2 N_{\text{QD}} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}(\mu - E_1 - \lambda_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)})\right) - \frac{a_1 n_0}{\left| \bar{\psi}^{(1)} \right|^2 N_{\text{QD}}} \right],$$

$$b_2 = \frac{e}{\varepsilon_d^{(2)} \varepsilon_0 a_2} \left| \bar{\psi}^{(2)} \right|^2 N_{\text{QD}} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E}(\mu - E_1 - \lambda_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)})\right) - \frac{a_2 n_0}{\left| \bar{\psi}^{(2)} \right|^2 N_{\text{QD}}} \right].$$

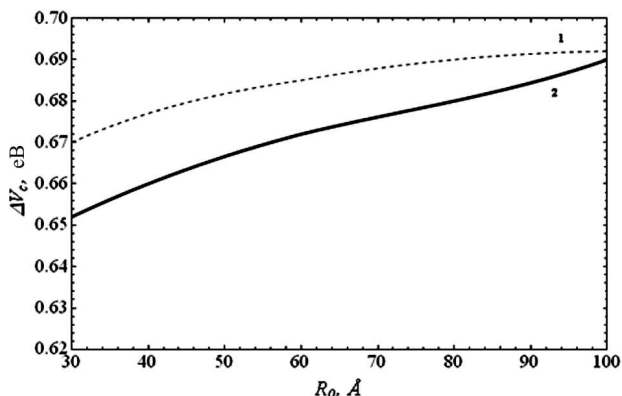
Коефіцієнти  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  у виразах (20), (21) визначаються з умов неперервності потенціалів  $\phi^{(1)}(r)$  і  $\phi^{(2)}(r)$  на напруженій гетеромезі та нормальних складових векторів електричного зміщення і умови електронейтральності:

$$\begin{cases} \phi^{(1)}(r)|_{r=R_0} = \phi^{(2)}(r)|_{r=R_0}, \\ \varepsilon^{(1)} \frac{d\phi^{(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = \varepsilon^{(2)} \frac{d\phi^{(2)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0}, \\ \int_0^{R_0} r^2 \Delta n^{(1)}(r) dr + \int_{R_0}^{R_1} r^2 \Delta n^{(2)}(r) dr = 0. \end{cases} \quad (22)$$

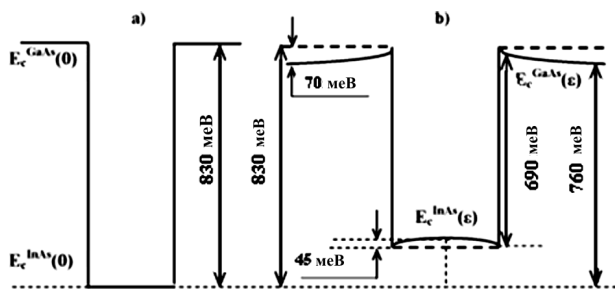
Таким чином, підставивши отримані вирази для компонент тензора механічної та електронної складових деформацій (6)–(11) та вирази для електростатичного потенціалу (20), (21) у формулу (1) отримуємо вираз для потенціальної енергії електрона в напруженій наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії.

#### 4. Результати розрахунків та їх обговорення

Розрахунок глибини квантуючого потенціалу та енергетичного спектра електронів здійснювався на прикладі наногетеросистеми InAs/GaAs з такими параметрами:  $R_0 = 100 \text{ \AA}$ ;  $R_1 = 1000 \text{ \AA}$ ;  $a_c^{(1)} = -5,08 \text{ eV}$ ;  $a_c^{(2)} = -7,17 \text{ eV}$ ;  $a_1 = 6,08 \text{ \AA}$ ;  $a_2 = 5,65 \text{ \AA}$ ;  $m^{(1)} = 0,057m_0$ ;  $m^{(2)} = 0,065m_0$ ;  $\alpha = 0,657 \text{ Н/м}$ ;  $n_0 = 10^{17} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{\text{QD}} = 5,5 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ;  $\Delta E_c(0) = 0,83 \text{ eV}$ . Відлік енергії як для потенціальної ями, так і для енергетичних рівнів ведеться від вершини дна потенціальної ями електрон-деформаційного потенціалу.

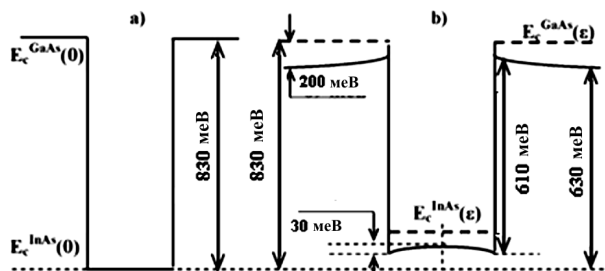


**Рис. 2.** Залежність глибини потенціальної ями електронів у напруженій сферичній КТ від її радіуса  $R_0$  при ( $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ;  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ): 1 (штрихова лінія) – з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; 2 (суцільна лінія) – з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів



**Рис. 3.** Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом  $R_0 = 100 \text{ Å}$ ,  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , що формується: тільки за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$  (a); за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$  та механічної складової деформаційного потенціалу (b, пунктирна лінія); за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$ , механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та внеску електростатичної енергії (b, суцільна лінія)

На рис. 2 наведено результати числового розрахунку глибини потенціальної ями  $\Delta V_c(\mathbf{r})$  для електрона в напруженій КТ від її розмірів із врахуванням внесків електростатичної енергії та енергії, зумовленої деформацією матеріалів КТ і матриці. Як бачимо, із збільшенням розміру  $R_0$  КТ, глибина квантуючого потенціалу електрона як з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу, так і з врахуванням електрон-деформаційного та електростати-



**Рис. 4.** Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом  $R_0 = 100 \text{ Å}$ ,  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , що формується: тільки за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$  (a); за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$  та механічної складової деформаційного потенціалу (b, пунктирна лінія); за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c(0)$ , механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу та внеску електростатичної енергії (b, суцільна лінія)

чного потенціалів монотонно зростає. Зокрема, при концентрації електронів провідності в матриці наногетеросистеми  $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ , глибина потенціальної ями з врахуванням електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів для  $R_0 = 30 \text{ Å}$  та  $R_0 = 100 \text{ Å}$  становить 0,652 eВ, 0,69 eВ відповідно, тоді як без врахування 0,67 eВ, 0,692 eВ. Зменшення глибини квантуючого потенціалу (рис. 2, суцільна лінія 2) відносно глибини потенціалу (рис. 2, пунктирна лінія 1) зумовлене внеском електростатичної енергії та дією додаткового стиску матеріалу КТ, що виникає за рахунок самоузгодженої електрон-деформаційної складової  $\varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r)$  потенціалу та залежить від розміру квантової точки  $R_0$ , ступеня заповнення зони провідності  $n_0$  матриці та поверхневої густини  $N_{\text{QD}}$  КТ.

На рис. 3, 4 зображено профіль та глибину квантуючого потенціалу для електронів у наногетеросистемі InAs/GaAs з КТ InAs при різних значеннях концентрації електронів провідності ( $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) у матриці GaAs з поверхневою густиною КТ  $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

Як видно з рис. 3, 4, електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу  $\varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r)$  та електростатична енергія  $-e\phi^{(i)}(\mathbf{r})$  зумовлюють енергетичне зміщення країв дозволених зон  $\Delta E_c^{(i)} = a_c^{(i)}\varepsilon^{(i)}(r) - e\phi^{(i)}(r)$ . Зокрема, при  $R_0 = 100 \text{ Å}$ ,  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  відбувається неоднорідне енергетичне зміщення (“ви-

пучування”) дна квантової ями в бік більших енергій відносно деформованого дна зони провідності, зумовленого механічною деформацією матеріалу КТ  $\sim 45$  меВ та країв дозовлених зон матриці в бік менших енергій  $\sim 70$  меВ. Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності на порядок ( $n_0 = 10^{18}$  см $^{-3}$ ) електрон-деформаційна складова деформації приводить до енергетичного пониження країв дозовлених зон матриці на 130 меВ.

Енергетичні спектри електрона розраховувалися чисельним методом стрільби [19] на основі розв’язку рівняння Шредінгера (15) з квантуючим потенціалом (1), що формується як механічною, так і електронною складовими електрон-деформаційного потенціалу  $a_e^{(i)}(\varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)}(r) + \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r))$  та енергією електростатичної взаємодії зарядів  $-e\phi^{(i)}(r)$  в околі межі КТ–матриця, яка виникає внаслідок перерозподілу електронів, зумовленого дією неоднорідної деформації матеріалів КТ–матриця.

На рис. 5 і 6 наведено результати числових розрахунків залежностей енергії електрона в основному і збудженому станах від розміру  $R_0$  КТ InAs при  $n_0 = 10^{17}$  см $^{-3}$ ,  $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10}$  см $^{-2}$ . Порівняння кривих 1 та 2 на рис. 5 і 6 показує, що електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу  $\varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r)$  та електростатична енергія  $-e\phi^{(i)}(r)$  приводять до немонотонного пониження енергії основного та збудженого станів електрона в діапазоні розмірів КТ  $30 \text{ \AA} \leq R_0 \leq 100 \text{ \AA}$  відносно енергії електрона, розрахованого з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу  $\varepsilon_{\text{mech.}}^{(i)}(r)$ . Зокрема, пониження енергії основного та збудженого станів електрона менш проявляється в діапазоні розмірів КТ  $30 \text{ \AA} \leq R_0 \leq 40 \text{ \AA}$  (6 меВ), ніж у діапазоні  $60 \text{ \AA} \leq R_0 \leq 100 \text{ \AA}$  (8–16 меВ). Такий характер поведінки енергетичних рівнів електрона в КТ залежно від її розміру  $R_0$  можна пояснити таким чином: ріст  $R_0$  зумовлює зменшення впливу поверхні (тиску Лапласа) і всесторонньої механічної деформації кристалічної ґратки матеріалу КТ (КТ стає більш масивною), що приводить до збільшення глибини потенціальної ями, тоді як складова електростатичної енергії квантуючого потенціалу приводить до підняття (пониження) дна зони провідності в КТ при  $n_0 = 10^{17}$  см $^{-3}$

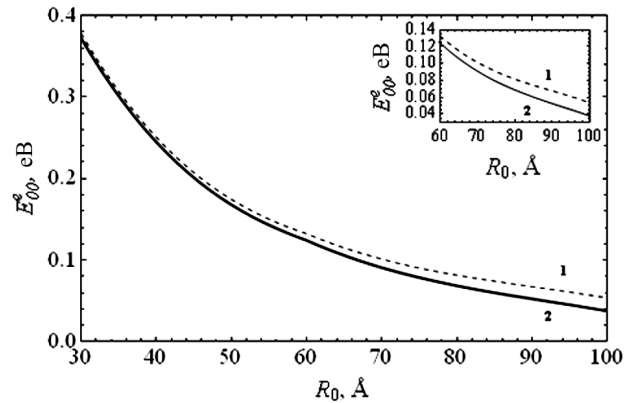


Рис. 5. Залежність енергії основного стану електрона  $E_{00}^e$  від розміру КТ InAs при ( $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10}$  см $^{-2}$ ;  $n_0 = 10^{17}$  см $^{-3}$ ): 1 (штрихова лінія) – з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; 2 (суцільна лінія) – з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів

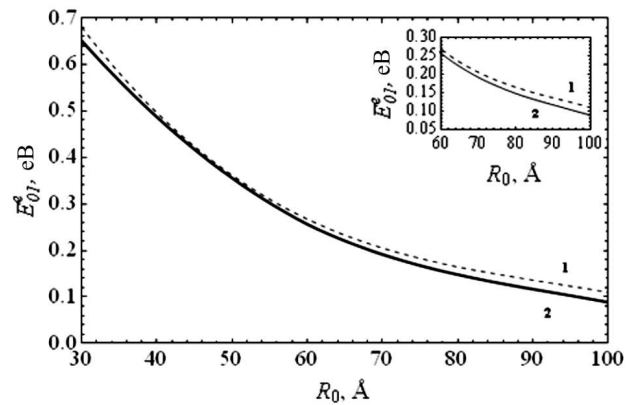


Рис. 6. Залежність енергії збудженого стану електрона  $E_{01}^e$  від розміру КТ InAs при ( $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10}$  см $^{-2}$ ;  $n_0 = 10^{17}$  см $^{-3}$ ): 1 (штрихова лінія) – з врахуванням тільки механічної складової електрон-деформаційного потенціалу; 2 (суцільна лінія) – з врахуванням як електрон-деформаційного, так і електростатичного потенціалів

( $n_0 = 10^{18}$  см $^{-3}$ ) відносно механічної складової електрон-деформаційного потенціалу відповідно (див. рис. 2, 3).

Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності в матеріалі матриці на порядок ( $n_0 = 10^{18}$  см $^{-3}$ ) енергетичні рівні електрона в КТ із врахуванням сумарного електрон-деформаційного та електростатичного потенціалів підвищуються на 7 меВ для  $R_0 = 100 \text{ \AA}$ , що по-

в'язане із збільшенням перерозподілу електронів у наногетеросистемі між КТ та матрицею.

Крім того, збільшення поверхневої густини КТ в інтервалі  $3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2} \leq N_{\text{QD}} \leq 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  при фіксованій середній концентрації електронів провідності у матриці GaAs  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , приводить до пониження енергетичних рівнів електрона в КТ, оскільки з ростом середньої концентрації електронів провідності електронна складова деформації збільшується, створюючи додатковий стиск матеріалу матриці і КТ, що приводить до зменшення глибини квантуючого потенціалу та пониження енергетичних рівнів електрона відповідно. Зокрема, при  $R_0 = 100 \text{ \AA}$ ,  $N_{\text{QD}} = 3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  енергія основного та збудженого станів електрона в КТ становить 44 меВ, 98 меВ, тоді як при  $N_{\text{QD}} = 5,5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  37 меВ, 88 меВ відповідно.

Отже, знаючи закономірності зміни положення енергетичних рівнів у КТ перенормованих як електрон-деформаційним, так і електростатичним потенціалами, залежно від її розміру  $R_0$ , середньої концентрації електронів провідності  $n_0$  в матриці наногетеросистеми та поверхневої густини квантових точок  $N_{\text{QD}}$  можна прогнозовано керувати спектральними характеристиками нанооптоелектронних приладів (резонансно-тунельні діоди) на основі напружених наногетеросистем з КТ (InAs/GaAs з КТ (InAs)).

## 5. Висновки

1. У межах запропонованої моделі досліджено вплив механічної і електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалу, та енергії електростатичної взаємодії зарядів на межі КТ-матриця на характер квантуючого потенціалу в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs.

2. Показано, що врахування електронної складової електрон-деформаційного потенціалу  $a_c^{(i)} \varepsilon_{\text{el.-def.}}^{(i)}(r)$  та енергії електростатичної взаємодії зарядів  $-e\phi^{(i)}(r)$  приводять до утворення в квантуючому потенціалі додаткових квазітрикутних бар'єрів та квазітрикутних потенціальних ям, енергетична висота яких залежить як від концентрації електронів провідності  $n_0$  в матриці напруженої наногетеросистеми, так і поверхневої густини  $N_{\text{QD}}$  КТ. Такі напружені наногетеросис-

теми з КТ з таким модифікованим квантуючим потенціалом можуть використовуватись як елементи для створення резонансно-тунельних діодів, транспортними властивостями яких можна керувати як ступенем легування  $n_0$  матриці, так і поверхневою густиною квантових точок  $N_{\text{QD}}$ .

3. Показано, що електронна складова електрон-деформаційного потенціалу та складова електростатичної енергії, зумовленої деформацією матеріалів КТ і матриці, приводять до пониження енергії основного та збудженого станів електрона в КТ розміром  $R_0 = 100 \text{ \AA}$  на 16 меВ, 21 меВ відповідно.

1. Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, та ін., ФТП **32**, 385 (1998).
2. М. Tkach, V. Holovatsky, O. Voitsekhivska, M. Mykhalyova, and R. Fartushynsky, Phys. Status Solidi B **225**, 331 (2001).
3. M. Korkusinski and P. Hawrylak, Phys. Rev. B. **63**, 195311 (2001).
4. А.Ф. Цацульников, А.Ю. Егоров, ФТП **31**, 851 (1997).
5. S.I. Pokutnyi, Ukr. J. Phys. Rev. **3**, 46 (2006).
6. S.M. Reimann and M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
7. C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, and A. Zunger, J. Appl. Phys. **83**, 2548 (1998).
8. M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, Phys. Rev. B. **52**, 11969 (1995).
9. А.В. Ненашев, А.В. Двуреченский, ЖЭТФ **118**, 570 (2000).
10. В.В. Мещеряков, ФТТ **42**, 1700 (2000).
11. Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелещак та ін., ФТП **36**, 543 (2002).
12. I.V. Stasyuk and R.M. Peleshchak, Ukr. Fiz. Zh. **39**, 856 (1994).
13. В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков, С.Ю. Вербин та ін., ФТП **34**, 467 (2000).
14. Z.M. Wang, K. Holmes, Yu.I. Mazur, and G.J. Salamo, Appl. Phys. Lett. **84**, 1931 (2004).
15. R.M. Peleshchak and I.Ya. Bachynsky, Condens. Matter Phys. **12**, 215 (2009).
16. В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е.Романов, ФТП **36**, 79 (2002).
17. К. Теодосиу, *Упругие модели дефектов в кристаллах* (Мир, Москва, 1985).
18. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теория упругости* (Наука, Москва, 1965).
19. М.В. Кутній, *Чисельні методи. Навчальний посібник для вищих навч. закл.* (Растр-7, Львів, 2010).

Одержано 12.11.13



*Р.М. Пелещак, Н.Я. Кулык*

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦИОННЫХ  
ЭФФЕКТОВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ  
КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В НАПРЯЖЕННЫХ  
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Резюме

В пределах самосогласованной электрон-деформационной модели построена теория формирования зонного профиля квантующего потенциала и энергетических уровней электрона и дырки в напряженной наногетеросистеме с когерентно напряженными квантовыми точками в зависимости от степени легирования  $n$  матрицы наногетеросистемы и их поверхностной плотности. Показано, что характер квантующего потенциала наногетеросистемы определяется не только механической составляющей электрон-деформационного потенциала, а также энергией электростатического взаимодействия зарядов, в пределе квантовая точка–матрица, что приводит к образованию дополнительных квазитреугольных барьеров и квазитреугольных потенциальных ям вблизи предела квантовая точка–матрица.

*R. M. Peleshchak, N. Ya. Kulyk*

INFLUENCE  
OF ELECTRON-DEFORMATION  
EFFECTS ON THE ELECTRON STRUCTURE  
OF QUANTUM DOTS IN STRESSED  
NANOHETEROSYSTEMS

Резюме

In the framework of the self-consistent electron-deformation model, the theory describing the formation of the quantum potential band profile and the energy levels of an electron and a hole in a stressed nanoheterosystem with coherently-strained quantum dots has been developed, and their dependences on the degree of doping of the nanoheterosystem matrix and the quantum dot surface concentration have been analyzed. The character of the quantum potential in the nanoheterosystem is shown to be governed not only by the mechanical component of the electron-deformation potential, but also by the energy of electrostatic interaction between charges in a vicinity of the quantum dot–matrix interface, where the latter induces additional quasi-triangular potential barriers and wells.