ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 16, № 4 (2015) С. 641-648

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 16, № 4 (2015) P. 641-648

DOI: 10.15330/pcss.16.4.641-648

УДК: 538.971, 538.915

ISSN 1729-4428

Р.М. Пелещак, Н.Я. Кулик

Вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі квантова точка – матриця на квантово-розмірні стани зарядів

Дрогобицький державний педагогічний університет ім. І. Франка, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100, e-mail: delenkonadia@mail.ru

З врахуванням рівняння механічної рівноваги проведено розвиток теорії збурення форми напруженої гетеромежі "квантова точка-матриця". В рамках моделі деформаційного потенціалу з врахуванням збурення поверхні квантової точки теоретично проаналізовано вплив неоднорідно-деформованої гетеромежі "квантова точка-матриця" на квантові стани зарядів, локалізованих всередині квантової точки.

Ключові слова: деформаційний потенціал, теорія збурення форми квантової точки, рівняння механічної рівноваги, рівняння Шредінгера.

Стаття поступила до редакції 23.06.2015; прийнята до друку 15.09.2015.

Вступ

З сучасним розвитком нанотехнологій і фізики квантових наносистем виникає питання про вплив форми, розмірів квантових точок (КТ), що представляють собою область з трьохвимірним обмеженням об’єму, і якості гетеромежі на квантові стани як вільних, так і зв'язаних носіїв заряду. Відомо, що електронні характеристики напівпровідникових приладів в значній мірі залежать від властивостей інтерфейсів межі поділу між різними матеріалами в гетероструктурах. Наприклад, в гетероструктурах InAs/GaAs (CdTe/ZnTe) з КТ якість гетеромежі (квантова точка – матриця) визначають транспортні (рухливість, час життя нерівноважних носіїв заряду) характеристики носіїв заряду і оптичні властивості оптоелектронних приладів на КТ, оскільки наявність гетеромежі призводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на шороховатостях поверхні [1, 2].

Розробка методів контролю за станом інтерфейсів стала особливо актуальною після появи багатошарових гетероструктур, які створюються на основі технології молекулярно-променевої епітаксії (МВЕ). Найбільш простий і надійний спосіб оцінки якості гетеромежі – дослідження екситонної фотолюмінесценції (ФЛ), спектральна форма і ширина смуг якої, дуже чутливі до відхилень гетеромеж від планарних [3]. Результати численних робіт, що спираються в основному на технології молекулярно-променевої епітаксії (МВЕ), показали, що розупорядкування гетеромежі викликає неоднорідне збільшення ширини смуг екситонної ФЛ [3-6]. У найбільш якісних структурах амплітуда флуктуації (dR_0), що виникла в результаті розупорядкування латерального розміру КТ (R_0) не перевищує одного атомного шару. Недоліком оптичного методу є неможливість оцінити поздовжні розміри неоднорідностей на гетеромежі і основний тип розсіюювання.

В роботі [7] пропонується новий метод оцінки якості поверхні гетеромежі шляхом аналізу спектрів циклотронного резонансу (ЦР). Він дозволяє оцінити поздовжні розміри неоднорідностей на гетеромежі і тип розсіювання в наногетероструктурі. Зокрема, у випадку короткодіючого розсіювання, форма лінії ЦР має характерні особливості у вигляді квантових осциляцій [8].

Теоретичне дослідження впливу розмірів, форми КТ і якості напруженої гетеромежі на електронні властивості наногетеросистеми пов'язане з проблемою знаходження розв’язку задачі про квантові стани системи, що перебувають в потенційній ямі довільної просторової форми, і задачею про деформацію матеріалу КТ і матриці. Зокрема, в роботі [9] запропоновано функціональний метод теорії збурення форми поверхні наносфери та проаналізовано вплив деформації форми сферичного нанооб'єкта на квантові стани носіїв заряду в ньому. Цей метод, на відміну від відомих [10-14] базується на розкладанні квантових величин в функціональний ряд по варіації форми поверхні нанооб'єктів, а не енергії. Слід зауважити, що задача [9] була розв'язана для окремо взятого нанооб'єкта без врахування матриці і деформації гратки матеріалу квантової точки з потенційною ямою з нескінченно високими стінками.

У даній роботі на основі функціонального методу теорії збурення форми поверхні з врахуванням рівняння механічної рівноваги досліджено вплив деформованої гетеромежі і аксіально-симетричного збурення форми сферичної квантової точки на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині неї.

I. Модель напруженої наногетеросистеми InAs/GaAs з неоднорідно-деформованою гетеромежею КТ-матриця

Розглядається гетеросистема InAs/GaAs з когерентно-напруженими КТ InAs із збуреною формою у вигляді аксіально-симетричної поверхні. Таке збурення зумовлене як флуктуацією товщини квантової ями, так і анізотропією сталих пружності матеріалів КТ і матриці. Збурення форми сферичного нанооб´єкта з врахуванням неоднорідно-деформованої гетеромежі описується рівнянням

$$\tilde{R}(q) = R(q) + u_r^{(1)}(R(q), q), \qquad (1)$$

де $R(q) = R_0\sqrt{1 + p^2\cos^g(kq)}$; g, k, p – параметри, від значень яких залежать величина і вид варіації сферичної форми; q – кут між радіусом-вектором, наведеним з початку координат до точки на поверхні і віссю Z (рис. 1); $u_r^{(1)}(R(q), q)$ – радіальна

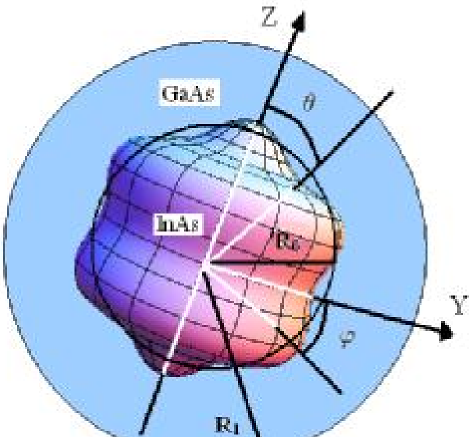

Рис. 1. Деформований сферичний нанооб'єкт з рівнянням поверхні $\tilde{R}(q) = R_0\sqrt{1 + p^2\cos^g(kq)} + u_r^{(1)}(R(q), q)$, який знаходиться в матриці R_1 з параметрами $p^2 = 0.2$; $g = 2$; $k = 3$.

компонента вектора зміщення атомів. Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з одною КТ, зроблено наступне наближення. Енергію попарної пружної взаємодії КТ замінено енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації $s_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ $(N-1)$. Оскільки постійна гратки матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs, то при гетероепітаксії в межах псевдоморфного росту InAs на GaAs матеріал InAs піддається деформації стиску, а GaAs – деформації розтягу. Тому неоднорідно-деформовану сферичну КТ можна представити пружним дилатаційним нановключенням з радіусом $R(q)$, поміщеним в порожнину матриці GaAs радіусом R_1. Об’єм порожнини менший від об’єму нанооб'єкта на ΔV [15].

Для визначення компонент тензора деформації використовували рівняння механічної рівноваги [16]

$$\vec{\nabla} div \vec{u} = 0, \qquad (2)$$

з наступними граничними умовами:

$$\begin{cases} 4pR^2(q)\left(u_r^{(2)}\Big|_{r=R(q)} - u_r^{(1)}\Big|_{r=R(q)}\right) = \Delta V, \\ s_{rr}^{(1)}\Big|_{r=R(q)} = s_{rr}^{(2)}\Big|_{r=R(q)} - P_L, \qquad P_L = \dfrac{2a}{R(q)}, \\ s_{rr}^{(2)}\Big|_{r=R_1} = -s_{ef}(N\text{-}1), \end{cases} \qquad (3)$$

де $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів в i-тому напівпровідниковому матеріалі, P_L – лапласівський тиск; α – міжфазна вільна енергія між матеріалом КТ InAs та матриці GaAs, яка згідно роботи [17] визначається: $a = \dfrac{\int_0^{R_1} r^{(i)} c_l^{(i)} e^{(i)2}(r) r^2 dr}{2pR_0 u_r^{(1)}(R_0)}$. Різниця об’ємів пружного дилатаційного мікровключення і порожнини в матриці GaAs дорівнює $\Delta V = 4pR^3(q) f$, де $f = \dfrac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%$ – параметр невідповідності постійних граток матеріалу КТ InAs і матриці GaAs.

Розв’язок рівняння (2) має вигляд:

$$u_r^{(i)}(r, q) = C_1^{(i)}(q) r + \frac{C_2^{(i)}(q)}{r^2}, \quad i = \begin{cases} 1 \equiv InAs \\ 2 \equiv GaAs \end{cases} \qquad (4)$$

Поле зміщень визначають наступні компоненти тензора деформації:

$$e_{rr}^{(1)}(r, q) = e_{jj}^{(1)}(r, q) = e_{qq}^{(1)}(r, q) = C_1^{(1)}(q), \qquad (5)$$

$$e_{rr}^{(2)}(r, q) = C_1^{(2)}(q) - \frac{2C_2^{(2)}(q)}{r^3}, \qquad (6)$$

$$e_{jj}^{(2)}(r, q) = e_{qq}^{(2)}(r, q) = C_1^{(2)}(q) + \frac{C_2^{(2)}(q)}{r^3} \quad ,(7)$$

Механічні напруження в матеріалах квантової точки $s_{rr}^{(1)}$ і матриці $s_{rr}^{(2)}$ дорівнюють:

$$s_{rr}^{(i)}=\frac{E_i}{(1+n_i)(1-2n_i)}\left[(1-n_i)e_{rr}^{(i)}(r,q)+n_i\left(e_{jj}^{(i)}(r,q)+e_{qq}^{(i)}(r,q)\right)\right], \tag{8}$$

де n_i – коефіцієнти Пуассона, E_i – модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці. Коефіцієнти $C_1^{(1)}(q)$, $C_1^{(2)}(q)$, $C_2^{(2)}(q)$ знаходяться з розв’язку системи рівнянь (3) з урахуванням (4) – (8).

II. Спектр енергії носіїв заряду в наногетеросистемі з неоднорідно - деформованою гетеромежею квантова точка-матриця

Розглянемо задачу про вплив деформованої геометричної форми квантової точки на енергетичний спектр носіїв заряду всередині цього нанооб'єкта, який знаходиться в матриці. При цьому скористаємося наближенням ефективної маси і будемо моделювати деформовану КТ скінченною потенціальною ямою з формою поверхні $S(e(\vec r))$. Форму потенціальної ями можна отримати, варіюючи вигляд незбуреної поверхні $S_0(\vec r)$ КТ [9] з врахуванням рівняння механічної рівноваги (2).

Спектр енергії $E(e^{(1)}(R_0,q),e^{(2)}(R_0,q))$ квазічастинки в деформованій потенціальній ямі з аксіально-симетричним збуренням форми сферичної КТ, знаходимо на основі функціонального методу збурення форми поверхні нанооб'єкта [9]

$$E(e^{(1)}(R_0,q),e^{(2)}(R_0,q))\approx E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0))\left[1-\frac{d\tilde R^2(e^{(1)}(R_0,q))}{R_0^2}\right], \tag{9}$$

де $d\tilde R^2(e^{(1)}(R_0,q))=\tilde R^2(q)-R_0^2$; $e^{(i)}(R_0,q)=Spe^{(i)}(R_0,q)$; $E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0))$ – спектр енергії квазічастинки в деформованій квантовій точці з незбуреною поверхнею знаходиться з розв´язку рівняння Шредінгера спільно з рівнянням механічної рівноваги (2)

$$\hat H_{e,h}^0 y_{\mathrm{nl}}^0(r,q,j)=E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0,q),e^{(2)}(R_0,q))y_{\mathrm{nl}}^0(r,q,j), \tag{10}$$

з гамільтоніаном

$$\hat H_{e,h}^0=-\frac{\mathbf{h}^2}{2}\vec\nabla\frac{1}{m_{(e,h)}^{(i)}}\vec\nabla+\hat U_{(e,h)}(r), \tag{11}$$

де $\hat U_{(e,h)}(r)$ – потенціальна енергія квазічастинки в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з деформованими сферичними КТ InAs

$$\hat U_{(e,h)}(r)=\begin{cases}0, & 0\le r\le R_0,\\ \Delta E_{c,u}(0)-\left|a_{c,u}^{(1)}e^{(1)}(r)\right|-\left|a_{c,u}^{(2)}e^{(2)}(r)\right|, & R_0\le r\le R_1,\end{cases} \tag{12}$$

де $m_{(e,h)}^{(i)}$ – ефективні маси електрона і дірки; $\Delta E_{c,u}(0)$ – глибина потенційної ями для електрона і дірки в ненапруженій квантовій точці; $a_c^{(i)}$, $a_u^{(i)}$ – константи гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності і валентної зони i-того матеріалу, відповідно.

Зокрема, енергія основного E_{10}^0 і збудженого станів E_{11}^0 електрона та дірки в сферичній КТ є коренями наступних трансцендентних рівнянь:

$$\frac{m_{(e,h)}^{(2)}}{m_{(e,h)}^{(1)}}\left[1-k_{1(e,h)}R_0\cdot ctg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)\right]=\frac{1+k_{2(e,h)}R_0+e^{2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)}\cdot\left(k_{2(e,h)}R_0-1\right)}{1-e^{2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)}}$$

$$\frac{\dfrac{tg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)}{k_{1(e,h)}R_0}-1}{2+\left(k_{1(e,h)}R_0-\dfrac{2}{k_{1(e,h)}R_0}\right)tg\left(k_{1(e,h)}R_0\right)}=$$

$$=\frac{m_{(e,h)}^{(2)}}{m_{(e,h)}^{(1)}}\frac{1+k_{2(e,h)}R_0-\left(1-k_{2(e,h)}R_0\right)\exp\left(2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)\right)}{\left(1+\left(1-k_{2(e,h)}R_0\right)^2\right)\dfrac{1+k_{2(e,h)}R_1}{1-k_{2(e,h)}R_1}\exp\left(2k_{2(e,h)}\left(R_0-R_1\right)\right)-\left(1+\left(1+k_{2(e,h)}R_0\right)^2\right)}$$

де $k_{1(e,h)}^2=\dfrac{2m_{(e,h)}^{(1)}}{\hbar^2}E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0)),\quad k_{2(e,h)}^2=\dfrac{2m_{(e,h)}^{(2)}}{\hbar^2}\left(U_{(e,h)}(r)-E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0))\right),\ \ n=1,3,5...$

Коли системи координат, в яких описуються рух квазічастинки і форма поверхні квантової точки збігаються, то кут θ $(q\equiv\vec{r}\wedge z)$ можна розглядати як кут між вектором моменту кількості руху квазічастинки і виділеним напрямком у просторі. Тоді кут θ у виразах для квантових величин квазічастинки повинен квантуватися $\cos^2 q_{lm}=\dfrac{m^2}{l(l+1)}$, де l,m – орбітальне і магнітне квантові числа квазічастинки, відповідно.

З урахуванням останнього виразу, формула (9) набуде вигляду

$$E_{nlm}=E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0))\left\{1-p^2\left[4\left(\frac{m^2}{l(l+1)}\right)^{\frac{3}{2}}-3\left(\frac{m^2}{l(l+1)}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^2\right\},\tag{13}$$

Як видно із співвідношення (13), знімається енергетичне виродження по квантовому числу m. Це пов'язано з пониженням симетрії форми квантової точки, тобто з переходом від сферичної симетрії до аксіальної. Поправки першого порядку малості до хвильових функцій у квантовій точці і матриці запишуться у вигляді:

$$\Delta\psi_{nlm}^1(r,q,j)+k_1^2\psi_{nlm}^1(r,q,j)=-\frac{2m^{(1)}\Delta E_{nlm}^1}{\hbar^2}\psi_{nl}^{0(1)}(r,q,j),\quad 0\le r\le R(q),\tag{14}$$

$$\Delta\psi_{nlm}^2(r,q,j)+k_2^2\psi_{nlm}^2(r,q,j)=-\frac{2m^{(2)}\Delta E_{nlm}^1}{\hbar^2}\psi_{nl}^{0(2)}(r,q,j)\quad R(q)\le r\le R_1,$$

де $$\psi_{nl}^{0(i)}(r,q,j)=\begin{cases}R_{nl}^{(1)}(r)Y_{lm}, & 0\le r\le R_0\\ R_{nl}^{(2)}(r)Y_{lm}, & R_0\le r\le R_1\end{cases},$$

$\Delta E_{nlm}^1=E_{nlm}-E_{nl}^0(e^{(1)}(R_0),e^{(2)}(R_0))$ – поправка першого порядку малості для енергії.

Використовуючи метод функції Гріна можна знайти розв´язок задачі (14). Рівняння для функцій Гріна задачі (14) мають такий вигляд:

$$\Delta G_1(r,r)+k_1^2 G_1(r,r)=-d(r-r)\,,\qquad \Delta G_2(r,r)+k_2^2 G_2(r,r)=-d(r-r)\,,$$
$$G_1(r,r)\big|_{r=R(q)}=G_2(r,r)\big|_{r=R(q)}\,. \qquad (15)$$

Функція Гріна з початком в центрі кулі, для областей всередині і зовні нанооб'єкта представляється у вигляді:

$$G_1(r,r)=\frac{1}{4p}\left[\frac{\exp\left\{-ik_1\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|\right\}}{\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|}-\frac{\exp\left\{-ik_1\left|\overset{\mathbf{r}}{r}+\overset{\mathbf{r}}{r}-2R(q,j)\frac{\overset{\mathbf{r}}{r}}{r}\right|\right\}}{\left|\overset{\mathbf{r}}{r}+\overset{\mathbf{r}}{r}-2R(q,j)\frac{\overset{\mathbf{r}}{r}}{r}\right|}\right],\qquad 0\le r\le R(q)\,, \qquad (16)$$

$$G_2(r,r)=\frac{1}{4p}\left[\frac{\exp\left\{-ik_2\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|\right\}}{\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|}-\frac{\exp\left\{-ik_2\left|\overset{\mathbf{r}}{r}+\overset{\mathbf{r}}{r}-2R(q,j)\frac{\overset{\mathbf{r}}{r}}{r}\right|\right\}}{\left|\overset{\mathbf{r}}{r}+\overset{\mathbf{r}}{r}-2R(q,j)\frac{\overset{\mathbf{r}}{r}}{r}\right|}\right],\quad R(q)\le r\le R_1$$

Використаємо наступний розклад [18]

$$\frac{\exp\left\{-ik\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|\right\}}{\left|\overset{\mathbf{r}}{r}-\overset{\mathbf{r}}{r}\right|}=-k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\begin{cases} j_l(-k\cdot r)h_l(-k\cdot r)P_l(\cos g), r<r\\ j_l(-k\cdot r)h_l(-k\cdot r)P_l(\cos g), r>r\end{cases}, \qquad (17)$$

$$P_l(\cos g)=\frac{4p}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(q,j)Y^*_{lm}(q_1,j_1)\,,\ g=\overset{\mathbf{r}}{r}\wedge\overset{\mathbf{r}}{r}\,.$$

З врахуванням виразу (17) функція Гріна в сферичних координатах запишеться:

$$G_i(r,r,q,j,q_1,j_1)=\frac{1}{4p}\left[-k_i\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}4p\begin{cases} j_l(-k_i\cdot r)h_l(-k_i\cdot r)Y_{lm}(q,j)Y^*_{lm}(q_1,j_1), r<r\\ j_l(-k_i\cdot r)h_l(-k_i\cdot r)Y_{lm}(q,j)Y^*_{lm}(q_1,j_1), r>r\end{cases}\right] \qquad (18)\}$$

Тоді, хвильова функція квазічастинки у неоднорідно-деформованому сферичному нанооб'єкті, що знаходиться в матриці запишеться в наступному вигляді:

$$\psi^1_{nlm}(r,q,j)=c_1\int_0^{2p}\int_0^{p}\left\{\int_0^{r}G_1(r,r,q,j,q_1,j_1)+\int_r^{R(q)}G_1(r,r,q,j,q_1,j_1)\right\}\psi^{0(1)}_{nl}(r,q_1,j_1)r^2\sin q_1 dr dq_1 dj_1\times$$
$$+c_2\int_0^{2p}\int_0^{p}\left\{\int_{R(q)}^{r}G_2(r,r,q,j,q_1,j_1)+\int_r^{R_1}G_2(r,r,q,j,q_1,j_1)\right\}\psi^{0(2)}_{nl}(r,q_1,j_1)r^2\sin q_1 dr dq_1 dj_1\,, \qquad (19)$$

де $c_i=-\dfrac{2m^{(i)}\Delta E^1_{nlm}}{\mathbf{h}^2}$.

III. Результати розрахунків та їх обговорення

Тут приведено числові результати теоретичних досліджень спектра енергії електрона E_{nlm} у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі і квадратів модулів хвильових функцій квантово-розмірних станів частинки $\psi^0_{nlm}(r,q,j)$, а також поправки першого порядку до цих хвильових функцій $\psi^1_{n,l,m}(r,q,j)$ у неоднорідно-деформованому сферичному нанооб'єкті, що знаходиться в матриці.

Розрахунки проведено для наногетеросистеми InAs/GaAs з напруженими КТ InAs при наступних значеннях параметрів [16]: $R_0=100\overset{0}{A}$, $R_1=500\overset{0}{A}$, $a_c^{(1)}=-5{,}08eB$, $a_c^{(2)}=-7{,}17eB$, $a^{(1)}=6{,}8\overset{0}{A}$, $a^{(2)}=5{,}65\overset{0}{A}$, $m^{(1)}=0{,}057m_0$, $m^{(2)}=0{,}065m_0$, $a=0{,}657H/м$, $\Delta E_c(0)=0{,}83eB$. Енергія відраховується від дна потенціальної ями, створеної механічно-напруженою квантовою точкою.

На рис. 2 приведені результати числових розрахунків залежностей енергії електрона в основному і в першому збудженому станах від розміру КТ InAs в *деформованій потенціальній ямі*: із збуренням сферичної форми КТ (рис. 2, крива $1-n=1;l=0;m=0$; крива $1'-n=1;l=1;m=\pm1$); без збурення сферичної форми КТ (рис. 2, крива $1''-n=1;l=1;m=0$); і *в недеформованій потенціальній ямі:* із збуренням сферичної форми КТ (рис. 2, крива $2-n=1;l=0;m=0$; кривая

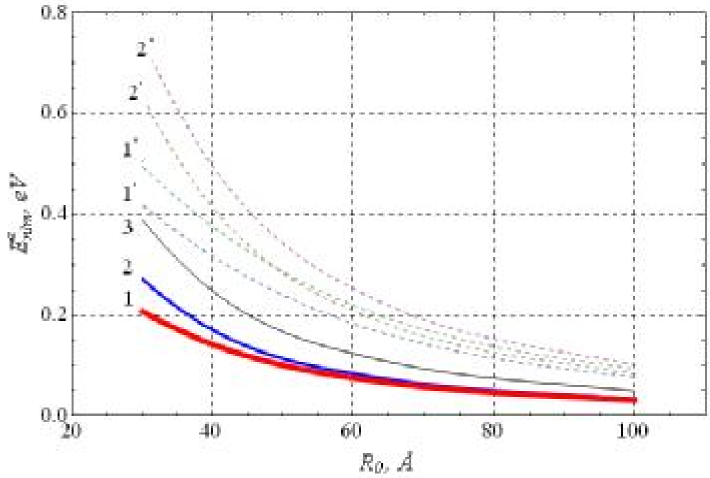

Рис. 2. Спектр енергії електрона в квантовій точці: а) з аксіально-симетричним збуренням її форми: $1, 1'$ – з врахуванням деформації матеріалу КТ в основному E_{100} і в першому збудженому E_{111} станах, відповідно; $2, 2'$ – без врахування деформації матеріалу КТ в основному E'_{100} і в першому збудженому E'_{111} станах, відповідно; б) без аксіально-симетричного збурення її форми: $1''$ – з врахуванням деформації матеріалу КТ в першому збудженому стані E_{110}; $3, 2''$ – без врахування деформації матеріалу КТ в основному E''_{100} і в першому збудженому E'_{110} станах, відповідно.

$2' - n = 1; l = 1; m = \pm 1$); без збурення сферичної форми КТ (рис. 2, крива $3 - n = 1; l = 0; m = 0$; крива $2'' - n = 1; l = 1; m = 0$).

Як видно (рис. 2) енергія електрона монотонно спадає із збільшенням розміру R_0 КТ, тобто енергетичні рівні зсуваються в довгохвильову область спектра, а енергетична відстань між ними зменшується. Величина енергії зростає із збільшенням квантових чисел l і m відносно основного стану. Слід відмітити, що збурення сферичної форми КТ, що знаходиться в матриці призводить до зменшення енергії електрона в основному стані E_{100} у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі (крива - 1) відносно енергії E'_{100} у недеформованій скінченній потенціальній ямі (крива - 2) на 132 меВ при $R_0 = 30\,\overset{0}{A}$, а при $R_0 = 100\,\overset{0}{A}$ – 10меВ. Це пов'язано з тим, що деформаційний потенціал зменшує глибину потенційної ями в КТ. Зокрема, енергія першого збудженого стану електрона в деформованій потенціальній ямі в КТ (крива $1'$) з аксіально-симетричним збуренням її форми є меншою відносно енергії збудженого стану електрона E'_{111} у недеформованій скінченній потенціальній ямі (крива $2'$) на 385 меВ при $R_0 = 30\,\overset{0}{A}$, а при $R_0 = 100\,\overset{0}{A}$ - 15 меВ. У випадку відсутності аксіально-симетричного збурення форми КТ характер функціональної залежності енергетичних рівнів першого збудженого стану від R_0 як з деформацією матеріалу КТ, так і без деформації зберігається такий же як і з аксіально-симетричним збуренням форми.

Збурення сферичної форми КТ понижує енергію збудженого стану E_{110} електрона в деформованій потенціальній ямі до енергії збудженого стану E_{111} електрона в сферичній КТ (криві $1', 1''$). Крім цього, рівень енергії електрона E_{110} в деформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ при $R_0 = 50\,\overset{0}{A}$ перемішується з енергетичним рівнем електрона E'_{111} у недеформованій потенціальній ямі із збуреною сферичною формою КТ (криві $1''$ і $2'$).

На рис. 3 представлені нормовані на максимальне значення квадрати модулів хвильових функцій електрона $\psi^0_{n,l,m}$ в основному $(n = 1, l = m = 0)$ і в першому збудженому $(n = 1, l = 1, m = 0)$ станах в сферичній деформованій КТ без збурення її форми

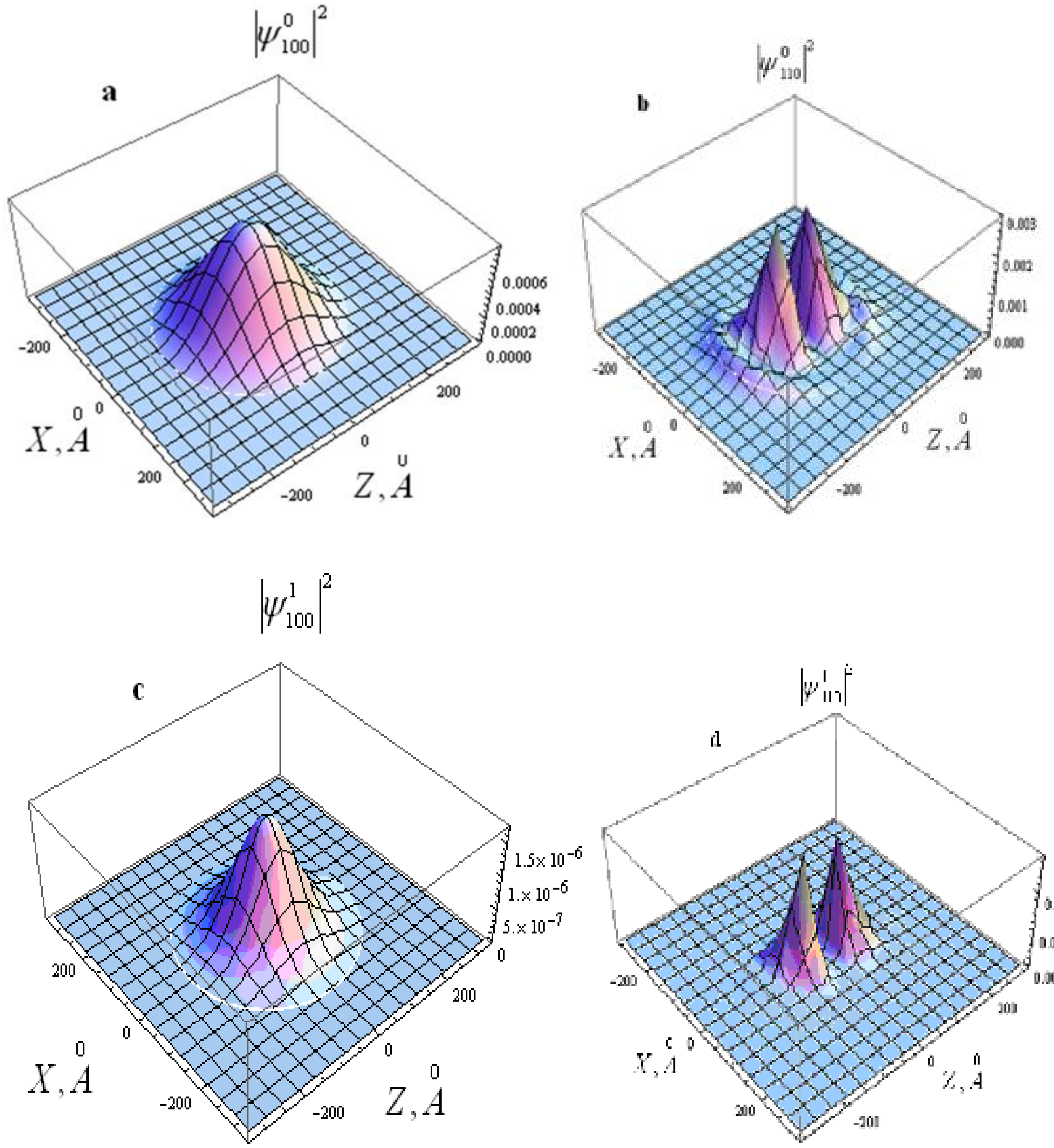

Рис. 3. Нормовані на максимальне значення квадрати модулів хвильових функцій квантово-розмірних станів електрона в КТ: без збурення сферичної форми КТ в основному ψ^0_{100} (a) і в першому збудженому ψ^0_{110} станах (b), а також поправки першого порядку ψ^1_{100}, ψ^1_{110} до цих хвильових функцій – 3c, 3d, відповідно.

(3a, 3b-відповідно), а також поправки першого порядку до цих хвильових функцій електрона $\psi^1_{n,l,m}$ (3c, 3d) в деформованій КТ із збуреною формою (формула (1)). Відхилення форми від сферичної приводить до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона всередині КТ, а взаємодія КТ з матрицею до зменшення ймовірності локалізації електрона в КТ.

Хвильова функція квазічастинки у неоднорідно-деформованому сферичному наноб'єкті, що знаходиться в матриці, чутлива як до збурення форми поверхні нанооб'єкта, так і до деформації його матеріалу. Зміна густини ймовірності локалізації квазічастинки буде проявлятися на оптичних, фотолюмінісцентних, контактних і поверхневих властивостях наногетероструктур.

Висновки

1. Показано, що енергія електрона в основному і в першому збудженому станах у неоднорідно-деформованій скінченній потенціальній ямі КТ з аксіально-симетричним спотворенням її форми є меншою ніж енергія електрона у недеформованій скінченній потенціальні ямі з таким же спотворенням її форми.

2. Установлено, що енергія електрона в основному і в першому збудженому станах в деформованій скінченній потенціальній ямі КТ з аксіально-симетричним спотворенням її форми є меншою ніж енергія електрона в сферичній КТ.
3. Показано, що перший збуджений рівень енергії електрона E_{110} у деформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ при $R_0 = 50\overset{0}{A}$ перемішується з першим збудженим енергетичним рівнем E'_{111} електрона в недеформованій потенціальній ямі з незбуреною сферичною формою КТ.
4. Встановлено, що аксіально-симетричне збурення сферичної форми квантової точки InAs і деформація її матеріалу приводять до перерозподілу густини ймовірності локалізації електрона в КТ, а електрон-деформаційна взаємодія КТ з матрицею InAs/GaAs приводить до суттєвого зменшення густини ймовірності локалізації електрона в КТ.

Пелещак Р.М. - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики;
Кулик Н.Я. – аспірант.

[1] H. Sakaki, T. Noda, K. Hirakawa, M. Tanaka and T. Matsusue, Applied Physics Letters 51, 1934 (1987).
[2] I. Vurgaftman and. J.R. Meyer, Phys.Rev. B60, 14294 (1999).
[3] P.S. Kop'ev, I.N. Ural'cev, D.R. Jakovlev,Al.L. Jefros, A.V. Vinokurova FTP 22, 424 (1988).
[4] H. Kalt, J. Collet, S.D. Baranovskii, Rosari Saleh, P. Thomas, Le Si Dang, and J. Cibert, Phys. Rev. B 45, 4253 (1992).
[5] T. Taguchi, Y. Kawakami, Y. Yamada, Physica B: Condensed Matter. 191, 23 (1993).
[6] N.N. Ledencov, S.V. Ivanov, V.M.Maksimov ta in. FTP 29, 65 (1995).
[7] Ju.B. Vasil'ev, S.D. Suchalkin, S.V. Ivanov ta in. FTP 31(10), 1246 (1997).
[8] T. Ando, J.Phys. Soc. Japan. 38, 989 (1975).
[9] V.P. Dzjuba, Ju.N. Kul'chin, V.A. Milichko FTT 56(2), 355 (2014).
[10] F.M. Mors, G. Feshbah, Metody teoreticheskoj fiziki (1958), Tom 1.
[11] A.B. Shmelev, UFN 106, 450 (1972).
[12] L.D. Landau, E.M. Lifshic, Kvantovaja mehanika (Fizmatlit, Moskva, 2002).
[13] Al.L. Efros, A.V. Rodina, Phys. Rev. B 47, 10005 (1993).
[14] A.B. Migdal, Kachestvennye metody v kvantovoj teorii (Nauka, Moskva,1975).
[15] R.M. Peleshhak, N.Ja. Kulik, UFZh 59(11), 1099 (2014).
[16] B.V. Novikov, G.G. Zegrja, R.M. Peleshhak ta in. FTP 42(9), 1094 (2008).
[17] R.M. Peleshhak, O.O. Dan'kiv, O.V. Kuzik UFZh 56(4), 346 (2011).
[18] A.Messija, Kvantovaja mehanika, Tom 1. (1978).