

УДК 538.971,538.915

## ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА «КВАНТОВАЯ ТОЧКА — МАТРИЦА» НА КВАНТОВО-РАЗМЕРНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЗАРЯДА

Н. Я. Кулык, д. ф.-м. н. Р. М. Пелешак, к. ф.-м. н. М. В. Дорошенко,  
Ю. О. Угрын, М. В. Забилык

Дрогобычский государственный педагогический университет имени Ивана Франко  
Украина  
delenkonadia@mail.ru

*В рамках модели деформационного потенциала рассчитаны компоненты тензора деформации материала аксиально-деформированной сферической квантовой точки в матрице. Проведено развитие теории возмущения формы напряженной гетерограницы «квантовая точка — матрица», с помощью которой исследовано влияние неоднородно-деформированной квантовой точки на квантово-механические состояния зарядов, локализованных внутри ее.*

*Ключевые слова: деформационный потенциал, теория возмущения формы квантовой точки, уравнение механического равновесия, уравнение Шредингера.*

Разработка методов контроля состояния интерфейсов стала особенно актуальной после появления многослойных гетероструктур InAs/GaAs (CdTe/ZnTe) с квантовыми точками (КТ), которые создаются на основе технологии молекулярно-лучевой эпитаксии.

В [1] был предложен функциональный метод теории возмущения формы поверхности наносферы и проанализировано влияние деформации формы сферического нанобъекта на квантовые состояния носителей заряда в нем. Этот метод, в отличие от известных [2], базируется на разложении квантовых величин в функциональный ряд по вариации формы поверхности нанобъекта, а не энергии. Следует отметить, что задача [1] была решена для отдельно взятого нанобъекта без учета матрицы и деформации решетки материала квантовой точки с потенциальной ямой с бесконечно высокими стенками.

В данной работе осуществлено развитие теории возмущения напряженной границы раздела «квантовая точка — матрица» с помощью которой исследовано влияние неоднородно деформированной гетерограницы на квантово-механические состояния зарядов, локализованных внутри квантовой точки.

Рассматривается гетеросистема InAs/GaAs с когерентно-напряженными КТ InAs. Форма возмущенного сферического нанобъекта описывается аксиально-симметричным искажением

$$R(\Theta) = R_0 \sqrt{1 + p^2 \cos^2(k\Theta)}, \quad (1)$$

где  $\gamma$ ,  $k$ ,  $p$  — параметры, от значений которых зависит величина и вид вариации сферической формы;  $\Theta$  — угол между радиусом-вектором, приведенным из начала координат к точке на поверхности, и осью  $Z$ . Чтобы свести задачу с большим количеством КТ к задаче с одной КТ, принимается следующее приближение. Энергию попарного упругого взаимодействия КТ заменяем энергией взаимодействия каждой КТ с усредненным полем упругой деформации  $\sigma_{ef}(N-1)$  всех остальных  $(N-1)$  КТ. Поскольку постоянная решетки материала InAs больше, чем матрицы GaAs, при гетероэпитаксии в пределах псевдоморфного роста InAs на GaAs материал InAs поддается деформации сжатия, а GaAs — деформации растяжения. Поэтому деформированную сферическую КТ можно представить упругим дилатационным нановключением с радиусом  $R(\Theta)$ , которая вставляется в полость радиуса  $R_1$  в матрице GaAs. Объем полости меньше объема нанобъекта на  $\Delta V$ .

Для определения компонент тензора деформации использовали уравнение равновесия

$$\vec{\nabla} \operatorname{div} \vec{u} = 0 \quad (2)$$

со следующими граничными условиями для сферической КТ:

$$\begin{cases} 4\pi R^2(\Theta) \left( u_r^{(2)} \Big|_{r=R(\Theta)} - u_r^{(1)} \Big|_{r=R(\Theta)} \right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)} \Big|_{r=R(\Theta)} = \sigma_{rr}^{(2)} \Big|_{r=R(\Theta)} - P_L, \\ \sigma_{rr}^{(2)} \Big|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}(N-1), \end{cases} \quad (3)$$

где  $P_L$  — лапласовское давление,  $P_L = 2\alpha / R(\Theta)$ ;  $\alpha$  — поверхностная энергия КТ InAs;  $\Delta V$  — разница объемов упругого дилатационного микровключения и полости в матрице GaAs,  $\Delta V = 4pR^3(\Theta)f$ ;  $f$  — параметр несоответствия постоянных решетки материалов КТ и матрицы.

Энергетический спектр зарядов, локализованных в деформированной квантовой точке, находится совместно с уравнением механического равновесия (2) из решения уравнения Шредингера [3]:

$$\hat{H}_{e,h} \Psi^{(e,h)}(R, \Theta, \phi) = E^{(e,h)} \Psi^{(e,h)}(R, \Theta, \phi) \quad (4)$$

с гамильтонианом  $\hat{H}_{e,h} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\nabla^2}{m^{*(e,h)}} + U^{(e,h)}(R, \Theta)$ ,  $m^{*(e,h)}$  — соответственно, значения эффективные массы электрона и дырки.

Потенциальная энергия частицы в напряженной наногетеросистеме InAs/GaAs с деформированными сферическими КТ InAs определяется по формуле

$$U^{(e,h)}(R, \Theta) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R(\Theta), \\ V^{(e,h)} = \Delta E_{c,v}(0) - \left| a_{c,v}^{(1)} \varepsilon^{(1)}(R, \Theta) \right| - \left| a_{c,v}^{(2)} \varepsilon^{(2)}(R, \Theta) \right|, & R(\Theta) \leq r \leq R_1, \end{cases} \quad (5)$$

где  $\Delta E_{c,v}(0)$  — соответственно, глубина потенциальных ям для электрона и дырки в недеформированной гетероструктуре InAs/ GaAs,  $\varepsilon^{(i)}(R, \Theta)$  — параметр деформации;  $i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs} \\ 2 \equiv \text{GaAs} \end{cases}$ .

Таким образом, в результате решения задачи были найдены спектр энергии  $E(\varepsilon(R, \Theta))$  частицы в неоднородно-деформированной потенциальной яме, имеющей уравнение поверхности  $S(\varepsilon(R, \Theta))$ , и квадраты модулей волновых функций квантово-размерных состояний частицы в неоднородно-деформированном сферическом нанобъекте, находящемся в матрице.

Результаты данной работы могут быть использованы для оценки качества гетерограниц с помощью расчетных спектров циклотронного резонанса.

#### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Дзюба В. П., Кульчин Ю. Н., Миличко В. А. Квантово-размерные состояния деформированной наносферы // ФТТ.— 2014.— Вып. 56(2).— С. 355.
2. Морс Ф. М., Фешбах Г. Методы теоретической физики. Том 1. — Москва: ИЛ, 1958.
3. Новиков Б. В., Зебря Г. Г., Пелешак Р. М. и др. Барические свойства квантовых точек InAs // ФТП.— 2008.— Вып. 42(9).— С. 1094.

N.Y. Kulyk, R.M. Peleshchak, M.V. Doroshenko, J.O. Uhryn, M.V. Zabilyk

#### The influence of inhomogeneous deformation of the quantum dot — matrix interface on the quantum-dimensional state of charge

Within the model of the deformation potential are calculated the components of deformation tensor of the material of axially deformed spherical quantum dot in the matrix. The theory of form perturbation of strained quantum dot — matrix heterojunction was developed, which made it possible to investigate the effect of inhomogeneously deformed quantum dots on the quantum-dimensional states of charge trapped inside it.

Keywords: *deformation potential, perturbation theory of quantum dot form, mechanical equilibrium equation, Schrodinger equation.*