

І.Я. Бачинський, Р.М. Пелешак

## Модифікація квантуючого потенціалу напруженої наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовими точками InAs під впливом електрон – деформаційної взаємодії

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра загальної фізики, вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100, Львівська обл., E-mail: [slajider@rambler.ru](mailto:slajider@rambler.ru)

В межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі побудовано теорію формування зонного профілю квантуючого потенціалу в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками InAs в залежності від ступеня легування п-матриці (GaAs). Встановлено, що характер квантуючого потенціалу наногетеросистеми з квантовими точками визначається не тільки механічною складовою деформаційного потенціалу, а також електрон-деформаційною, яка приводить до утворення додаткових квазітрикутних бар'єрів та квазітрикутних потенціальних ям поблизу межі квантова точка-матриця. Показано, що висота квазітрикутних бар'єрів та глибина квазітрикутних потенціальних ям суттєво залежить від ступеня заповнення зони провідності п-матриці(GaAs).

**Ключові слова:** квантові точки, електрон-деформаційний та електростатичні потенціали.

*Стаття постуила до редакції 15.07.2010; прийнята до друку 15.09.2010.*

### Вступ

В останні роки великий інтерес представляють дослідження квантово-розмірних структур, а, зокрема, нового класу твердотільних нанооб'єктів – квантових точок (КТ), в яких здійснюється просторове обмеження носіїв заряду у всіх трьох напрямках [1-3]. Останні досягнення методу субмоношарової міграційно-стимульованої епітаксії дозволяють вирощувати як окремі КТ, так і цілі масиви когерентно-напружених КТ, на основі яких створюються сучасні нано - оптоелектронні прилади (лазери, світлодіоди, діоди Шотткі)[4-6]. Побудова лазерів на основі масивів КТ(InAs/GaAs) дозволяє вдосконалювати їхні технічні характеристики [7], а також дає можливість змінювати, за рахунок електрон-деформаційних параметрів, довжину хвилі генерації в довгохвильову область, що важливо в плані практичного застосування.

Глибина і характер квантуючого потенціалу визначається профілем дна зони провідності і вершини валентної зони гетероструктури. Цей профіль розглядається як потенціальна енергія, яка визначає енергетичний спектр і квантові стани як електрона, так і дірки. У роботах [7-9] профіль тривимірної потенціальної ями, створеної КТ, моделювався прямокутним потенціалом. Глибина визначалася тільки за рахунок різних ширин заборонених зон матриці і КТ.

У випадку когерентно-напружених КТ за наявності в їх околі полів пружних неоднорідних напруг глибина і форма квантуючого потенціалу визначається як характером неоднорідної деформації матриці і КТ, так і електрон – деформаційною взаємодією. Зокрема, у гетеросистемі InAs/GaAs (001) з масивом КТ (InAs) неузгодження параметрів кристалічних ґраток становить  $f = 7\%$ . Оскільки різниця параметрів ґраток InAs і GaAs значна, напруження, що виникають у гетеросистемі з КТ істотно впливають на структуру дозволених зон та на їх розрив. У роботі [7] проведено оцінку впливу ізотропної пружної деформації на глибину прямокутної потенціальної ями КТ (InAs) сферичної симетрії у гетеросистемі InAs/GaAs.

Оскільки напружені наногетеросистеми з квантовими точками InAs/GaAs, CdTe/ZnTe володіють значними константами деформаційного потенціалу ( $a_c^{InAs} = -5.08 \text{ eV}$ ;  $a_c^{GaAs} = -7.17 \text{ eV}$ [10]) то при значних концентраціях електронів провідності ( $n_0 \leq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) суттєво проявляється електрон – деформаційна взаємодія, яка перенормує квантуючий потенціал напруженої наногетеросистеми, що в кінцевому приводить до зміни положення енергетичних рівнів локалізованих у квантовій точці. Знаючи закономірність зміни локалізованих рівнів можна буде за допомогою електрон-деформаційних параметрів прогнозовано керувати довжиною хвилі генерації

наногетеролазерів на квантових точках та висотою бар'єра діоду Шотткі з вбудованим шаром КТ. У зв'язку з цим стає актуальною задача про вплив самоузгодженої електрон – деформаційної взаємодії на глибину і профіль потенціальної ями для електронів і дірок у напруженій наногетеросистемі з квантовими точками. Зміна глибини та профілю потенціальної ями для електронів та дірок буде суттєво залежати, як від ступеня заповнення зони провідності матриці наногетеросистеми, так і деформації матеріалів матриці та квантових точок.

## I. Модель когерентно- напруженої наногетеросистеми з квантовими точками

У даній роботі розглядається наногетеросистема InAs/GaAs з квантовими точками, які не мають чітко вираженої кристалографічної огранки, зокрема, квантові точки, форма яких наближено відображає сферичну симетрію. Такий випадок реалізується, наприклад, в гетеросистемі InAs/GaAs (001) з квантовими точками InAs, коли товщина нарощуваного шару InAs порядку 2 моношарів[11,12]. У зв'язку з цим 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, було зроблене наступне наближення: енергія попарної пружної взаємодії КТ замінена енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем

$$\Delta V^{c,v}(\mathbf{r}) = \Delta E_c + a_2^{c,v} e_{mech.}^{(2)}(\mathbf{r}) - a_1^{c,v} e_{mech.}^{(1)}(\mathbf{r}) - e(f_2^{c,v}(\mathbf{r}) - F_1^{c,v}(\mathbf{r})), \quad i = \begin{cases} 1 \equiv InAs, & 0 \leq r \leq R_0 \\ 2 \equiv GaAs, & R_0 \leq r \leq R_1 \end{cases} \quad (1)$$

де  $R_0$  – радіус квантової точки,  $R_1$  – радіус матриці,  $\Delta E_c$  - глибина потенціальної ями для електронів в КТ InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs;  $a_1^{c,v}, a_2^{c,v}$  - гідростатичні константи деформаційного потенціалу зони провідності та валентної зони в матеріалах квантової точки і матриці відповідно;  $e_i(\mathbf{r}) = Sp \epsilon_i$  – параметр деформації  $i$ -того матеріалу наногетероструктури визначається через зміщення атомів  $\mathbf{u}_i$ , які знаходяться з рівняння рівноваги:

$$\nabla \text{div} \mathbf{F}_i = -D^{(i)} \cdot \mathbf{F}^{(i)}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

$$\text{де } \mathbf{F}^{(i)}(\mathbf{r}) = -ed \mathbf{E}^{(i)}, D^{(i)} = \frac{(1+n_i)(1-2n_i)}{(a_i)^3 E_i (1-n_i)}$$

тут  $d \mathbf{E}^{(i)}$  – надлишкове електричне поле, яке виникає в околі напруженої межі квантова точка – матриця,

пружної деформації  $S_{ef}(N-1)$  всіх інших КТ[13]. Таким чином, квантова точка InAs в матриці  $n$  – GaAs створює потенціальну яму для електронів, а в  $p$ -GaAs – потенціальну яму для дірок відповідно. Дані потенціальні ями можуть заряджатись негативним та позитивним зарядом.

Під впливом неоднорідної деформації стиску матеріалу квантової точки InAs та неоднорідної деформації розтягу матеріалу матриці GaAs, яка оточує квантову точку, локально змінюється зонна структура наногетеросистеми з квантовими точками. Така зміна, внаслідок самоузгодженого електрон – деформаційного зв'язку, приводить до перерозподілу електронів в околі напруженої межі квантова точка – матриця, в результаті чого в матеріалі квантової точки, поблизу гетеро межі, є надлишок негативного заряду, а в матеріалі матриці – недостача. Таким чином, на напруженій гетеро межі квантова точка – матриця виникає  $n^+ - n$  перехід (електрон – деформаційний диполь  $\mathbf{P}_{el-def}^i$  [14]).

## II. Профіль квантуючого потенціалу напруженої наногетеросистеми з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон – деформаційної взаємодії

Глибина потенціальної ями для електрона і дірки в напруженій наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням самоузгодженої електрон – деформаційної взаємодії визначається наступним співвідношенням:

напруженість якого визначається через градієнт електростатичного потенціалу  $\left( dE^{(i)} = -\frac{dF^{(i)}(\mathbf{r})}{dr} \right)$ ;

$a_i$  – параметр ґратки  $i$ -того матеріалу наногетероструктури;  $n_i$  – коефіцієнт Пуассона;  $E_i$  – модуль Юнга;  $e$  – заряд електрона.

Рівняння рівноваги(2) у випадку сферичної симетрії запишеться у вигляді:

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2} u_r^{(i)} = D^{(i)} e \frac{dF^{(i)}(r)}{dr} \quad (3)$$

де  $u_r^{(i)}$  – радіальна компонента зміщення атомів у  $i$ -тому напівпровідниковому матеріалі. Загальний розв'язок неоднорідного рівняння(3) представиться у вигляді суми механічної  $u_{rmech}^{(i)}(r)$  та електрон – деформаційної  $u_{rel-def}^{(i)}(r)$  складових зміщень:

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

де

$$u_{r\text{mech}}^{(i)}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}, \quad u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r) = -\frac{D^{(i)} e}{r^2} \int r^2 F^{(i)}(r) dr$$

Як впливає з формули (4) сумарне зміщення визначається механічною ( $u_{r\text{mech}}^{(i)}(r)$ ) та електрон-деформаційною ( $u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r)$ ) складовими. Електрон-деформаційну складову зміщення можна змінювати такими технологічними параметрами як концентрацією електронів провідності та поверхневою густиною квантових точок  $N_{\text{QD}}$ .

Поле механічних зміщень визначає наступні компоненти тензора механічних деформацій:

$$e_{rr\text{mech}}^{(1)} = e_{ff\text{mech}}^{(1)} = e_{qq\text{mech}}^{(1)} = C_1^{(1)}, \quad (5)$$

$$e_{rr\text{mech}}^{(2)} = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \quad (6)$$

$$e_{ff\text{mech}}^{(2)} = e_{qq\text{mech}}^{(2)} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3} \quad (7)$$

Механічна складова всебічної деформації:

$$e_{\text{mech}}^{(i)} = e_{rr\text{mech}}^{(i)} + e_{ff\text{mech}}^{(i)} + e_{qq\text{mech}}^{(i)} = 3C_1^{(i)} \quad (8)$$

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

$$e_{rr\text{el-def}}^{(i)} = D^{(i)} e \left( \frac{2}{r^3} \int r^2 F^{(i)}(r) dr - F^{(i)}(r) \right), \quad (9)$$

$$e_{ff\text{el-def}}^{(i)} = e_{qq\text{el-def}}^{(i)} = -D^{(i)} e \left( \frac{1}{r^3} \int r^2 F^{(i)}(r) dr \right) \quad (10)$$

Електрон-деформаційна складова всебічної деформації:

$$e_{\text{el-def}}^{(i)} = e_{rr\text{el-def}}^{(i)} + e_{ff\text{el-def}}^{(i)} + e_{qq\text{el-def}}^{(i)} = -D^{(i)} e F^{(i)}(r) \quad (11)$$

Коефіцієнти  $C_1^{(1)}, C_1^{(2)}, C_2^{(2)}$ , знаходяться із розв'язку наступної системи рівнянь:

$$\begin{cases} u_r^{(2)} \Big|_{r=R_0} - u_r^{(1)} \Big|_{r=R_0} = f R_0, \\ s_{rr}^{(1)} \Big|_{r=R_0} = s_{rr}^{(2)} \Big|_{r=R_0} + P_L \Big|_{r=R_0}, \\ s_{rr}^{(2)} \Big|_{r=R} = -s_{ef} (N-1); \end{cases} \quad P_L = \frac{2a}{R_0 - |u_r^{(1)}|} \quad (12)$$

$a$  – поверхнева енергія КТ (InAs)[15],  $f$  – параметр невідповідності ґраток контактуючих

матеріалів:  $f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\%$  ;  $s_{rr}^{(i)}$  – радіальні складові тензора механічної напруги  $i$  – того матеріалу[16].

Потенціал  $F^{(i)}(\mathbf{r})$  знаходиться з рівняння Пуассона

$$\Delta F_i(\mathbf{r}) = \frac{e}{e_d^{(i)} e_0} \Delta n_i(\mathbf{r}), \quad (13)$$

де  $e_d^{(i)}$  – відносна діелектрична проникність  $i$ -того матеріалу наногетероструктури;  $\Delta n_i(\mathbf{r}) = n_i(r) - n_0$  – зміна електронної густини в околі гетеромежі квантова точка – матриця, яка визначається через суперпозицію добутку хвильових функцій, які знаходяться з рівняння Шредінґера(14),  $n_0$  – середня концентрація електронів провідності в наногетероструктурі з квантовими точками:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \Delta_{\mathbf{r}} + \Delta V^{c,v}(\mathbf{r}) \right] y_n^{(i)}(\mathbf{r}) = E_n y_n^{(i)}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

$$n_i(r) = \sum_n \frac{y_n^{*(i)}(\mathbf{r}) y_n^{(i)}(\mathbf{r})}{\exp(b(\frac{\mathcal{E}_n^0}{kT} - m_i)) + 1} \quad (15)$$

де  $m_i$  – хімічний потенціал  $i$ -того матеріалу наногетероструктури.

Рівняння для визначення електрохімічного потенціалу:

$$\frac{1}{\Omega_0} \int n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = n_0, \quad (16)$$

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

Рівняння Пуассона(13) для сферичної симетрії запишеться:

$$\frac{d^2 F^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dF^{(i)}}{dr} = \frac{e}{e_d^{(i)} e_0} (n_i(r) - n_0) \quad (17)$$

Концентрація носіїв заряду в напруженій наногетероструктурі з квантовою точкою розраховувалась через  $d$  - подібну густину електронних станів у квантовій точці

$d(E' - E_n) \approx \frac{1}{\sqrt{p/2\Delta E}} \exp\left(\frac{-2(E' - E_n)^2}{\Delta E^2}\right)$ . Зокрема, при температурі  $T = 0 K$  в квантовій точці ( $0 \leq r \leq R_0$ ) та матриці ( $R_0 \leq r \leq R_1$ ) розподіл концентрації носіїв заряду  $n_i(r)$  знаходиться за формулою:

$$n_i(r) = \int_0^{m - I_0^{(i)} - a_c^{(i)} e_r^{(i)} + e_f(r)} \frac{2N_{\text{QD}}}{a^{(i)} \sqrt{p/2\Delta E}} e^{-\frac{2(E' - E_n)^2}{\Delta E^2}} |y_{nlm}^{(i)}|^2 dE' = |y_{nlm}^{(i)}|^2 \frac{N_{\text{QD}}}{a^{(i)}} \left( \text{erf}\left(\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1\right) + \text{erf}\frac{\sqrt{2}}{\Delta E} (m - E_1 - I_0^{(i)} - a_c^{(i)} e_r^{(i)} + e_f(r)) \right) \quad (18)$$

де  $N_{\text{QD}}$  – поверхнева густина квантових точок, яка

рівна для наногетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками InAs  $\approx 3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [17];  $\Delta E$  –

півширина гаусівської лінії;  $E_1$  – енергія електрона на першому локалізованому рівні в квантовій ямі;  $Y_{nm}^{(i)}(r, q, f) = R_{nl}^{(i)}(r) \cdot Y_{lm}(q, f)$  – розв’язок рівняння Шредінгера(14) в сферичній системі координат;  $Y_{lm}(q, f)$  – сферичні функції Лежандра[18].

Оскільки в рівнянні Пуассона(17) концентрація носіїв заряду  $n_i(r)$  (18) є нелінійною функцією від  $f_i(r)$  його попередньо лінеаризуємо, тобто замість виразу (17) в рівняння Пуассона підставляємо його розклад в ряд Тейлора:

$$n_i(r) \approx |\mathcal{Y}_{nm}^{(i)}|^2 \frac{N_{QD}}{a^{(i)}} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} (m - E_1 - I_0^{(i)} - a_c^{(i)} e_{rr}^{(i)}) \right) + \sqrt{\frac{8}{p}} \frac{e}{\Delta E} e^{-\frac{-2(m - E_1 - I_0^{(i)} - a_c^{(i)} e_{rr}^{(i)})^2}{\Delta E^2}} \times e f_i(r) \right] \quad (19)$$

Розв’язок рівняння Пуассона(17) в квантовій точці та матриці, з врахуванням виразу для концентрації електронів(19) знаходився з усередненою густиною імовірності  $|\bar{\mathcal{Y}}_i|^2$  і відповідно має наступний вигляд:

$$f_1(r) = A_1 \frac{\sinh \left( \sqrt{\frac{1}{a_1}} r \right)}{r} - a_1 b_1, \quad 0 \leq r \leq R_0 \quad (20)$$

$$f_2(r) = B_1 \frac{\exp \left( -\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right)}{r} + B_2 \frac{\exp \left( \sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right)}{r} - a_2 b_2 - \frac{d_2}{2r} \times \left[ \exp \left( -\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) \times Ei \left( \sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) + \exp \left( \sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) \times Ei \left( -\sqrt{\frac{1}{a_2}} r \right) \right], \quad R_0 \leq r \leq R_1 \quad (21)$$

де

$$Ei(z) = -\int_{-z}^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt, \quad \frac{1}{a_2} = \frac{e^2}{e_d^{(2)} e_0 a^{(2)}} |\bar{\mathcal{Y}}_2|^2 N_{QD} \sqrt{\frac{8}{p}} \exp \left( \frac{-2(m - E_1 - I_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)})^2}{\Delta E^2} \right),$$

$$\frac{1}{a_1} = \frac{e^2}{e_d^{(1)} e_0 a^{(1)}} |\bar{\mathcal{Y}}_1|^2 N_{QD} \sqrt{\frac{8}{p}} \exp \left( \frac{-2(m - E_1 - I_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)})^2}{\Delta E^2} \right), \quad d_2 = \frac{2a_c^{(2)} C_2^{(2)} e}{e_d^{(2)} e_0 a^{(2)}} |\bar{\mathcal{Y}}_2|^2 N_{QD} \sqrt{\frac{8}{p}} \exp \left( \frac{-2(m - E_1 - I_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)})^2}{\Delta E^2} \right),$$

$$b_1 = \frac{e}{e_d^{(1)} e_0 a^{(1)}} |\bar{\mathcal{Y}}_1|^2 N_{QD} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} (m - E_1 - I_0^{(1)} - a_c^{(1)} C_1^{(1)}) \right) - \frac{a^{(1)} n_0}{|\bar{\mathcal{Y}}_1|^2 N_{QD}} \right],$$

$$b_2 = \frac{e}{e_d^{(2)} e_0 a^{(2)}} |\bar{\mathcal{Y}}_2|^2 N_{QD} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} E_1 \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{\sqrt{2}}{\Delta E} (m - E_1 - I_0^{(2)} - a_c^{(2)} C_1^{(2)}) \right) - \frac{a^{(2)} n_0}{|\bar{\mathcal{Y}}_2|^2 N_{QD}} \right].$$

Коефіцієнти  $A_1, B_1, B_2$  у виразах (20) і (21) визначаються з умов неперервності потенціалів  $f_1(r)$  та  $f_2(r)$  на напруженій гетеромежі та нормальній складовій вектора електричного зміщення та умови електронейтральності:

$$\begin{cases} f^{(1)}(r) \Big|_{r=R_0} = f^{(2)}(r) \Big|_{r=R_0} \\ e_1 \frac{df^{(1)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} = e_2 \frac{df^{(2)}(r)}{dr} \Big|_{r=R_0} \\ \int_0^{R_0} r^2 \Delta n_1(r) dr + \int_{R_0}^{R_1} r^2 \Delta n_2(r) dr = 0 \end{cases} \quad (22)$$

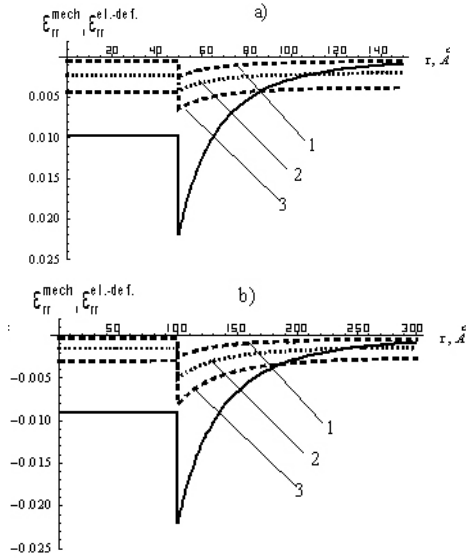
Таким чином, підставивши отримані вирази для компонент тензора механічної та електронної

### III. Числові розрахунки і обговорення результатів

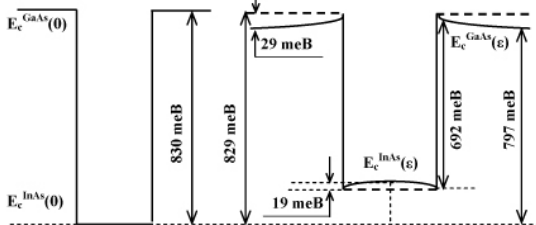
У даному параграфі, в рамках моделі деформаційного потенціалу, приведенні числові результати теоретичних досліджень координатної залежності глибини потенціальної ями для електронів та розподілу радіальної компоненти тензора механічної ( $e_{rr}^{mech}$ ) та електронної ( $e_{rr}^{el-def}$ ) складових деформації в квантовій точці та матриці для наногетеросистеми InAs/GaAs з такими параметрами [10,15,19]:  $a^{(1)} = 6.08 \text{ \AA}$ ;  $a^{(2)} = 5.65 \text{ \AA}$ ;  $C_{11}^{(1)} = 0.833 \text{ Мбар}$ ;  $C_{12}^{(1)} = 0.453 \text{ Мбар}$ ;  $C_{11}^{(2)} = 1.223 \text{ Мбар}$ ;  $C_{12}^{(2)} = 0.571 \text{ Мбар}$ ;  $\Delta E_c(0) = 830 \text{ меВ}$ ;  $a_c^{(1)} = -5.08 \text{ еВ}$ ;  $a_c^{(2)} = -7.17 \text{ еВ}$ ;  $E_g^{(1)}(0) = 0.36 \text{ еВ}$ ;  $E_g^{(2)}(0) = 1.452 \text{ еВ}$ ;  $R_1 = 1000 \text{ \AA}$ ;  $S_{ef} = 10^9 \text{ Н/м}^2$ ;  $m_1^{(e)} = 0.057 m_0$ ;  $m_2^{(e)} = 0.065 m_0$ ;  $a = 0.657 \text{ Н/м}$ ,  $N_{QD} = 3 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ .

На рис. 1 приведені числові розрахунки розподілу радіальної компоненти механічної ( $e_{rr}^{mech}$ , суцільна лінія) та електронної ( $e_{rr}^{el-def}$ , штрихові лінії) складових тензорів деформації у наногетеросистемі InAs/GaAs з квантовими точками розмірами  $R_0 = 50 \text{ \AA}$  (рис.1а),  $R_0 = 100 \text{ \AA}$  (рис.1б) при різних значеннях середньої концентрації електронів провідності  $n_0$ :  $10^{17} \text{ см}^{-3}$ ;  $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ;  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

Як видно з рис. 1 електронна складова радіальної компоненти тензора деформації  $e_{rr}^{el-def}$  приводить до додаткового стиску матеріалу квантової точки та матриці. З ростом середньої концентрації електронів провідності в інтервалі  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$  електронна складова деформації збільшується майже

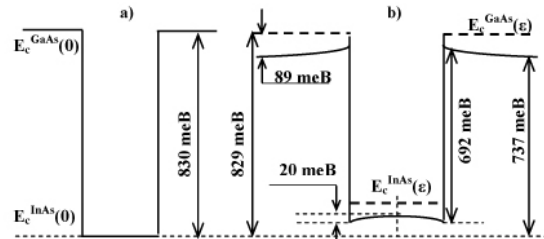


**Рис. 1.** Розподіл радіальної компоненти тензора механічної ( $e_{rr}^{mech}$  – суцільна лінія) та електронної ( $e_{rr}^{el-def}$  – штрихові лінії) складових деформації матеріалів сферичної квантової точки InAs радіусами  $R_0 = 50 \text{ \AA}$  (а),  $R_0 = 100 \text{ \AA}$  (б) та матриці GaAs для різних значень середньої концентрації електронів провідності: 1 (штрихова лінія) –  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ; 2 (штрихова лінія) –  $n_0 = 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ; 3 (штрихова лінія) –  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .



**Рис. 2.** Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом  $R_0 = 100 \text{ \AA}$ ,  $n_0 = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  який формується: – тільки за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$  (а); – за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$  та механічної складової деформаційного потенціалу (б, пунктирна лінія); – за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$ , механічної та електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалів (б, суцільна лінія).

складових деформацій (5)-(11) та вирази для електростатичного потенціалу (20), (21) у формулу (1) отримаємо вираз для потенціальної енергії електрона і дірки в напруженій наногетеросистемі з квантовими точками з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії.



**Рис. 3.** Профіль квантуючого потенціалу наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовою точкою InAs радіусом  $R_0 = 100 \text{ \AA}$ ,  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$  який формується: – тільки за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$  (а); – за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$  та механічної складової деформаційного потенціалу (б, пунктирна лінія); – за рахунок розриву зон провідності  $\Delta E_c$ , механічної та електрон-деформаційної складових деформаційного потенціалів (б, суцільна лінія).

на порядок. Така поведінка електронної складової тензора деформації пов'язана із збільшенням перерозподілу електронів у наногетеросистемі між квантовою точкою та матрицею. При збільшенні розміру квантової точки у два рази механічна складова деформації стиску матеріалу КТ зменшується на 10%, тоді як електрон-деформаційна – на 20%.

Як показують числові розрахунки квантуючого потенціалу електрон-деформаційна складова деформаційного потенціалу приводить до “випучування” дна квантової ями, в результаті чого воно приймає форму пляшкового дна, тобто поблизу гетеро межі квантова точка- матриця в КТ виникають квазітрикутні потенціальні ями. Зокрема, при  $R_0 = 100\text{Å}$ ,  $n_0 = 10^{17}\text{см}^{-3}$ ,  $N_{\text{QD}} = 3 \cdot 10^{10}\text{см}^{-2}$  випучування дна посередині квантової ями становить 19meV, тоді як при  $R_0 = 50\text{Å}$  – 7 meV. Ця випуклість виштовхує

рівні в ямі вверх. Числові оцінки показують, що ефект, зумовлений випучуванням дна для ями шириною до 100 Å у системі InAs/GaAs становить < 9 meV.

Отже, така напружена наногетеросистема з квантовими точками з модифікованим квантуючим потенціалом (рис. 2b,3b) може використовуватись для створення резонансно-тунельних діодів, транспортними властивостями яких можна керувати, як параметром  $n_0$ , так і поверхневою густиною квантових точок  $N_{\text{QD}}$ .

**Пелещак Р.М.** – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри;  
**Бачинський І.Я.** – аспірант.

- [1] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов. // *ФТП*, **32**(4), сс. 385-410 (1998).
- [2] А.Ф. Цацуньников, А.Ю. Егоров. // *ФТП*, **31**(7), сс. 851-854 (1997).
- [3] V.A. Shchukin et al. // *Phys.Rev.Lett.*, **75** (1995).
- [4] А.И. Якимов, А.В. Двуреченский, А.И. Никифоров, С.В. Чайковский. // *Письма в ЖЭТФ*, **75**(2) сс. 113-117 (2002).
- [5] S.D. Lin, V.V. Pichenko, V.V. Marin. // *Appl. Phys. Lett.*, **90** (2007).
- [6] В.Г. Талалаев., Б.В. Новиков. // *ФТП*, **34**(4), сс. 467-475 (2000).
- [7] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев, А.Е. Романов. // *ФТП*, **36**(1), сс. 79-85 (2002).
- [8] V.V. Tishchenko, Y.S. Raptis, N.V. Bondar. // *Solid. State Communs*, **96**(10), pp. 793-798 (1995).
- [9] И.А. Авруцкий, В.А. Сычугов. // *ФТП*, **25**(10), сс. 1787-1791 (1991).
- [10] G. Chris, Van de Walle // *Phys. Rev. B*, **39**, 1871 (1989).
- [11] В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков, С.Ю. Вербин, А.Б.Новиков, Д.Ш. Тхак, Г. Гобш, Р. Гольдхан, Н. Штейн. // *ФТП*, **34**(4), сс. 467-475 (2000).
- [12] Z.M. Wang, K. Holmes, Yu.I. Mazur and G.J. Salamo // *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 1931 (2004).
- [13] Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелещак, О.О. Данькив, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штром, Г.Э. Цырлин. // *ФТП*, **42**(9) сс. 1094-1101 (2008).
- [14] R.M. Peleshchak, I.Ya. Bachynsky. // *Condensed Matter Physics*, **12**(2), pp. 215-223 (2009).
- [15] E. Pehlke, N. Moll, M. Scheffler. // *Materials Theory*, **1**, 9607012 (1996).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теория упругости*. Наука, М. (1965).
- [17] P.N. Brounkov, A. Polimeni, S.T. Stoddart, M. Henini, L. Eaves, P.C. Main // *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1092 (1998).
- [18] З.З. Флюгге. *Задачи по квантовой механике*. Мир, М. (1974).
- [19] A. Qteish, R.J. Needs. // *Phys. Rev. B*, **45**, 1317 (1992).
- [20] Д.Н. Бычковский, Т.П. Воронцова, О.В. Константинов. // *ФТП*, **26**(12), сс. 2118-2128 (1992).

I.Y. Bachynsky, R.M. Peleshchak

## Modification of Quantum Potential of Strained Nanoheterosystem in As/GaAs with Quantum Dots InAs under the Influence of an Electron - Deformation Interaction

*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Department of Common Physics, 24 I.Franko str., Drohobych, Lviv Region, 82100 e-mail: slajider@rambler.ru*

The theory formation band shape quantum potential in strained nanoheterosystem InAs/GaAs with quantum dot InAs depending on a doping degree  $n$  - matrixes (GaAs) is constructed within the framework of self-compounded an electron - deformation model. Determined, that character quantum potential of the nanoheterosystem with quantum dots is formed not only mechanical composite deformation potential, but also an electron - deformation which leads to formation additional triangular barriers and triangular potential wells near boundary quantum dot-matrix. It is shown, that the height of triangular barriers and depth of triangular potential wells essentially depends on a degree of filling of a conduction band  $n$  - matrixes (GaAs).

**Key words:** quantum dots, electron-deformation and electrostatic potentials.