

08.3

## Энергетический спектр и волновые функции электронов в туннельно-связанных сферических квантовых точках InAs/GaAs

© Г.Ф. Глинский, Д.А. Шапран

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: genaglinskii@mail.ru

Поступило в Редакцию 7 ноября 2019 г.

В окончательной редакции 7 ноября 2019 г.

Принято к публикации 16 декабря 2019 г.

Представлены результаты численного расчета энергии основного состояния электрона и электронной плотности в туннельно-связанных квантовых точках InAs/GaAs, образующих простую кубическую сверхрешетку. Расчет проводится в рамках модифицированного метода эффективной массы, учитывающего микроскопическое (атомарное) строение отдельных квантовых точек, без учета спин-орбитального взаимодействия и деформационных эффектов. Исследована зависимость энергии связи электрона от радиуса квантовых точек  $R$ . Показано, что в области  $R < 27 \text{ \AA}$  энергия связи электрона пропорциональна  $R^3$ .

**Ключевые слова:** квантовые точки, сверхрешетки, электронная плотность.

DOI: 10.21883/PJTF.2020.06.49159.18104

Расчет энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в квантовых точках (КТ) относится к числу важнейших задач современной наноэлектроники. В настоящее время можно выделить два основных подхода к решению этой задачи. В основе первого из них лежат методы, приближающиеся к *ab initio*: это метод функционала плотности (DFT) [1] и метод псевдопотенциала [2–6]. Для реализации обоих методов требуются значительные вычислительные ресурсы. Второй подход основан на использовании традиционного метода эффективной массы в его континуальном приближении [7–10]. Однако неоднозначность определения эффективного  $kp$ -гамильтониана гетероструктуры (ГС), а также граничных условий для огибающих волновых функций не позволяет использовать его для расчета КТ малых размеров и сверхрешеток (СР) на их основе.

В работах [11–13] в рамках метода эффективной массы предложен новый подход к определению энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в полупроводниковых ГС, таких как квантовые ямы, проволоки, КТ и СР. В основе этого подхода лежит введение характеристической функции  $f(\mathbf{a})$ , указывающей на замещение в элементарной ячейке с номером  $\mathbf{a}$  атомов опорного кристалла атомами другого материала. В отличие от обычно используемого континуального приближения данный метод позволяет учесть микроскопическое строение ГС, а значит, ее реальную симметрию, включая симметрию интерфейсов. Было показано, что он может быть реализован в двух унитарно эквивалентных  $\mathbf{k}$ - и  $\mathbf{a}$ -представлениях. Для одиночных ГС конечных размеров и СР определение энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в обоих представлениях сводится к поиску собственных чисел и собственных столбцов эффективного матричного гамильтониана. В  $\mathbf{k}$ -представлении такой гамильтониан

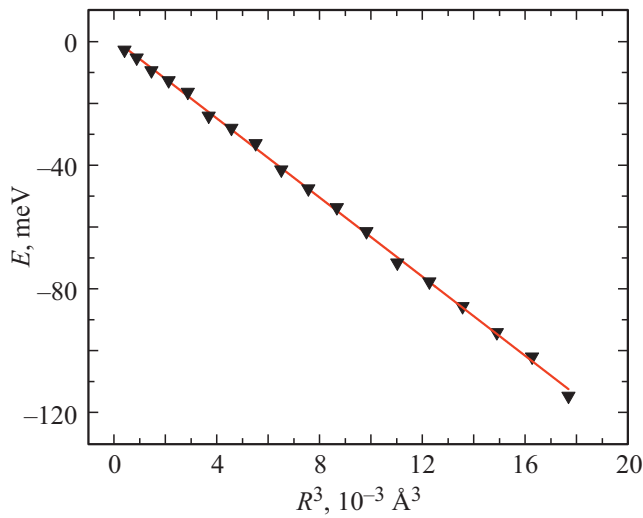
можно определить, используя  $kp$ -теорию возмущений или метод инвариантов [11,12]. Это позволяет корректным образом учесть в эффективном гамильтониане ГС интерфейсные поправки, обусловленные изменением зонных параметров материалов на гетерогранице, а также поправки, связанные с наличием короткодействующей части интерфейсного потенциала.

В настоящей работе данный подход используется для расчета энергетического спектра и огибающих волновых функций электронов в туннельно-связанных сферических КТ InAs/GaAs, образующих простую кубическую 3D СР. Исследуется зависимость энергии основного состояния электрона в центре зоны Бриллюэна СР ( $\mathbf{K} = 0$ ) от радиуса КТ  $R$  ( $R \approx 7\text{--}27 \text{ \AA}$ ). Расчет проводится в рамках однозонной  $\Gamma_1$ -модели без учета деформационных эффектов и спин-орбитального взаимодействия. Примитивные векторы трансляции прямой  $\mathbf{D}_{1,2,3}$  и обратной  $\mathbf{G}_{1,2,3}$  СР определяются соответственно как  $\mathbf{D}_1 = D_0(1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{D}_2 = D_0(0, 1, 0)$ ,  $\mathbf{D}_3 = D_0(0, 0, 1)$  и  $\mathbf{G}_1 = G_0(1, 0, 0)$ ,  $\mathbf{G}_2 = G_0(0, 1, 0)$ ,  $\mathbf{G}_3 = G_0(0, 0, 1)$ , где  $D_0 = pa_0$ ,  $G_0 = 2\pi/D_0$ ,  $a_0$  — постоянная решетки InAs,  $p = 13$ . В соответствии с этим объем сверхъядчейки  $\Omega_s = N\Omega_0$ , где  $N = 4p^3$  — число элементарных ячеек кристалла в сверхъядчейке ( $N = 8788$ ),  $\Omega_0 = a_0^3/4$  — объем элементарной ячейки.

Согласно [13], уравнение Шредингера для электрона в СР в  $\mathbf{k}$ -представлении для простой невырожденной зоны имеет вид

$$\sum_j H(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j; \mathbf{K}) F(\mathbf{k}_j; \mathbf{K}) = E(\mathbf{K}) F(\mathbf{k}_i; \mathbf{K}). \quad (1)$$

Здесь  $H(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j; \mathbf{K})$  — эффективный матричный  $kp$ -гамильтониан, параметрически зависящий от волнового вектора электрона в зоне Бриллюэна СР  $\mathbf{K}$ ;  $F(\mathbf{k}_j; \mathbf{K})$  — огибающая волновая функция



**Рис. 1.** Зависимость энергии основного состояния электрона ( $\mathbf{K} = 0$ ) от радиуса сферических КТ. Разрыв зоны проводимости  $\Delta E = 0.55$  eV. Энергия отсчитывается от дна зоны проводимости GaAs.

электрона в  $\mathbf{k}$ -представлении;  $\mathbf{k}_{i,j}$  — волновые векторы, пробегающие дискретный ряд значений ( $i, j = 1 \dots N$ ) и равные векторам обратной СР  $\mathbf{G} = m_1 \mathbf{G}_1 + m_2 \mathbf{G}_2 + m_3 \mathbf{G}_3$  ( $m_{1,2,3} = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ ), попадающим в зону Бриллюэна кристалла. Без учета поправок от короткодействующей части интерфейсного потенциала эффективный гамильтониан представим в виде [12]:

$$H(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j; \mathbf{K}) = E_{\text{InAs}}^{\Gamma_1} \delta_{ij} + \Delta E f(\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j) + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k}_i + \mathbf{K})^2}{2m_{\text{InAs}}^*} \delta_{ij} + \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{1}{m_{\text{GaAs}}^*} - \frac{1}{m_{\text{InAs}}^*} \right) \times (\mathbf{k}_i + \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{k}_j + \mathbf{K}) f(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j). \quad (2)$$

Здесь в качестве опорного кристалла выбран InAs,  $E_{\text{InAs}}^{\Gamma_1}$  — энергия, определяющая положение дна зоны проводимости InAs,  $\Delta E = E_{\text{GaAs}}^{\Gamma_1} - E_{\text{InAs}}^{\Gamma_1}$  — разрыв зоны  $\Gamma_1$  в ГС,  $m_{\text{InAs}}^*$  и  $m_{\text{GaAs}}^*$  — эффективные массы электронов в зоне  $\Gamma_1$  в InAs и GaAs соответственно,

$$f(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) = \frac{1}{N} \sum_l f(\mathbf{a}_l) e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{a}_l} \quad (3)$$

— фурье-образ характеристической функции  $f(\mathbf{a}_l)$ , которая принимает значение 1, если в элементарной ячейке с номером  $\mathbf{a}_l$  происходит замещение атомов InAs атомами GaAs, и 0, если такого замещения нет. Суммирование в (3) производится по всем векторам прямой решетки  $\mathbf{a}_l$  (узлам решетки Браве), попадающим в сверхъячейку СР ( $l = 1 \dots N$ ). Последнее слагаемое в правой части (2) следует рассматривать как поправку к методу эффективной массы, учитывающую изменение эффективной массы электрона при переходе через интерфейс. В континуальном приближении эта поправка

приводит к разрыву на интерфейсах первых производных от огибающих волновых функций.

Таким образом, в рассматриваемом нами подходе определение энергетического спектра электрона и его огибающих волновых функций в  $\mathbf{k}$ -представлении сводится к поиску параметрически зависящих от  $\mathbf{K}$  собственных чисел и собственных столбцов матричного гамильтониана (2), размерность которого  $N \times N$ . Переход к огибающим волновым функциям в  $\mathbf{a}$ -представлении  $F(\mathbf{a}_l; \mathbf{K})$  осуществляется посредством обратного фурье-преобразования

$$F(\mathbf{a}_l; \mathbf{K}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i F(\mathbf{k}_i; \mathbf{K}) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{a}_l}, \quad (4)$$

где экспоненциальные функции  $(1/\sqrt{N})e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{a}_l}$  удовлетворяют следующим условиям ортонормированности и полноты:

$$\frac{1}{N} \sum_l e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) \cdot \mathbf{a}_l} = \delta_{ij},$$

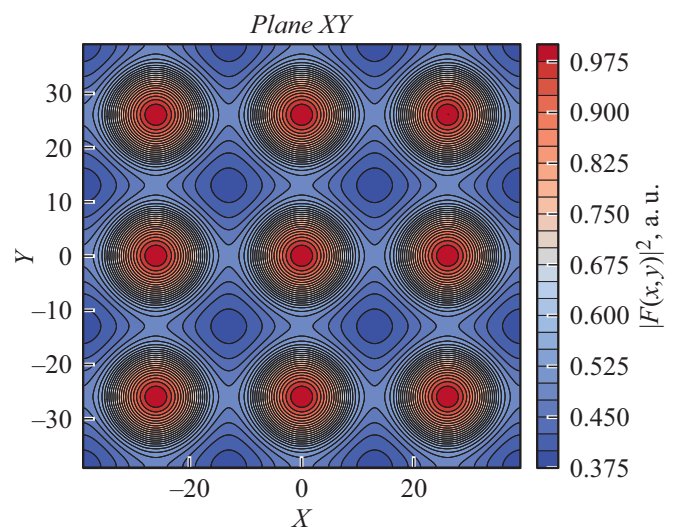
$$\frac{1}{N} \sum_l e^{i\mathbf{k}_i \cdot (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j)} = \delta_{ij}.$$

Огибающая волновая функция в  $\mathbf{x}$ -представлении определяется следующим соотношением [13]:

$$F(\mathbf{x}; \mathbf{K}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i F(\mathbf{k}_i; \mathbf{K}) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x}}. \quad (5)$$

Поскольку область, в которой определены  $N$  векторов  $\mathbf{k}_i$ , ограничена зоной Бриллюэна кристалла, это соотношение в отличие от (4) не является обратным преобразованием Фурье.

На рис. 1 и 2 представлены зависимость энергии основного состояния электрона в СР в центре зоны Бриллюэна ( $\mathbf{K} = 0$ ) от радиуса квантовой точки  $R$  и распределение электронной плотности  $|F(\mathbf{x}; 0)|^2$  в



**Рис. 2.** Распределение электронной плотности, соответствующее основному состоянию электрона ( $\mathbf{K} = 0$ ) в СР.

кристаллографической плоскости (001). Как следует из рис. 1, энергия связи электрона в области  $R < 27 \text{ \AA}$  пропорциональна  $R^3$ .

### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 16.1750.2017/4.6).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] *Hammerschmidt T., Kratzer P., Scheffler M.* // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. P. 235303 (1–16). DOI: 10.1103/PhysRevB.77.235303
- [2] *Wang L.W., Kim J., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 5678–5687.
- [3] *Wang L.W., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 15806–15818.
- [4] *Williamson A.J., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 15819–15824.
- [5] *Williamson A.J., Wang L.W., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 12963–12977.
- [6] *Luo J.W., Bester G., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 2009. V. 79. P. 125329 (1–15). DOI: 10.1103/PhysRevB.79.125329
- [7] *Wang L.W., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11417–11435.
- [8] *Fu H., Wang L.W., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. P. 9971–9987.
- [9] *Stier O., Grundmann M., Bimberg D.* // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 5688–5701.
- [10] *Moskalenko A.S., Berakdar J., Prokofiev A.A., Yassievich I.N.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 76. P. 085427 (1–9). DOI: 10.1103/PhysRevB.76.085427
- [11] Глинский Г.Ф. Полупроводники и полупроводниковые наноструктуры: симметрия и электронные состояния. СПб.: Технолит, 2008. 324 с. <http://www.twirpx.com/file/1014651/>
- [12] Глинский Г.Ф., Миронова М.С. // ФТП. 2014. Т. 48. В. 10. С. 1359–1369.
- [13] Глинский Г.Ф. // Письма в ЖТФ. 2018. Т. 44. В. 6. С. 17–24. DOI: 10.21883/PJTF.2018.06.45763.17113