

Неоднородное уширение основного электронного уровня в массиве квантовых точек

© В.И. Белявский[¶], С.В. Шевцов

Воронежский государственный педагогический университет,
394043 Воронеж, Россия

(Получена 17 декабря 2001 г. Принята к печати 23 декабря 2001 г.)

Рассмотрен вопрос о связи между статистическим распределением по форме и размерам квантовых точек и плотностью электронных состояний. Показано, что для массива нетождественных квантовых точек плотность состояний вблизи основного уровня имеет вид асимметричного пика, положение и форма которого определяются статистическими параметрами массива: равновесным радиусом, а также дисперсией и асимметрией распределения квантовых точек по размерам. Установлены общие соотношения между формой пика и этими параметрами.

1. В последние годы большой интерес представляет экспериментальное и теоретическое изучение свойств нового класса твердотельных объектов пониженной размерности — квантовых точек (КТ), в которых осуществляется пространственное ограничение носителей заряда во всех трех измерениях. Достигнутый к настоящему времени прогресс в области создания таких квазиуменьшенных объектов позволяет получать как отдельные КТ, так и целые массивы когерентно-напряженных КТ [1,2], обладающих рядом уникальных свойств, которые находят применение в новейших оптоэлектронных приборах. Так, уже реализованы лазеры на КТ, имеющие более высокие технические характеристики, чем лазеры на квантовых ямах, что обусловлено в основном δ -образным характером плотности состояний носителей в квазиуменьшенных системах и эффективным перекрытием волновых функций электрона и дырки из-за их пространственной локализации. В частности, электронный спектр изолированной КТ представляет собой набор дискретных уровней размерного квантования и в этом смысле подобен электронному спектру одиночного атома. Таким образом, КТ можно рассматривать как искусственно создаваемые гигантские атомы с контролируемо изменяемыми параметрами, такими как глубина и характер квантующего потенциала, размер и форма КТ, определяемыми технологией их получения.

Последние достижения метода субмонослойной миграционно-стимулированной эпитаксии позволяют выращивать массивы весьма однородных по своим размерам и формам КТ [1–4], которые образуются в результате спонтанного распада на островки тонкого слоя одного материала, осажденного на поверхность другого материала с отличающейся постоянной решетки. Такой распад обусловлен релаксацией упругих напряжений, возникающих в гетероэпитаксиальной системе при наличии рассогласования по постоянной решетки, и сопровождается выигрышем свободной энергии системы. Наибольший выигрыш достигается при определенных (равновесных) форме и размерах возникающих трехмерных островков. В реальных системах размеры

и форма отдельных КТ отклоняются от равновесных, что сказывается как на оптических свойствах систем с КТ [5–8], так и на возможности реализации на их основе оптоэлектронных приборов [7,9,10].

В связи с этим становится ясной необходимость систематического учета разброса геометрических параметров КТ при анализе физических свойств систем с КТ. В частности, такой разброс обуславливает неодинаковость электронного спектра отдельных КТ, выращиваемых в заданном технологическом режиме, что приводит к преобразованию δ -образных особенностей плотности состояний носителей в пики конечной ширины, профиль которых определяется статистическим разбросом геометрических параметров КТ. Таким образом, можно говорить о неоднородном уширении энергетических уровней в системах КТ. В данной работе при весьма общих предположениях о характере указанного разброса рассмотрен вопрос об уширении основного электронного уровня и исследована форма соответствующего пика плотности состояний.

Для исследования электронных состояний КТ воспользуемся методом эффективной массы в приближении огибающих функций [11], применяемым при описании свойств квантовых ям и квантовых проволок. В этом методе профиль дна зоны проводимости гетероструктуры рассматривается как потенциальная энергия, определяющая энергетический спектр и квантовые состояния электрона. В случае КТ скачок дна зоны проводимости на гетерогранице, обусловленный различием в ширине запрещенных зон материалов КТ и матрицы, формирует профиль, имеющий характер трехмерной потенциальной ямы. Для простоты предположим, что край зоны проводимости всюду, за исключением скачка на гетерогранице, сохраняет постоянное значение, что, вообще говоря, несправедливо в случае когерентно-напряженных КТ ввиду наличия в их окрестности полей упругих напряжений [7,12]. Тем не менее такой выбор квантующего потенциала представляется приемлемым, если принять во внимание ограниченность самой методики, основанной на применении метода эффективной массы к участкам полупроводника нанометровых размеров,

[¶] E-mail: vib@vspu.ac.ru

что дает основание рассчитывать лишь на качественное согласие результатов теории с опытом. В связи с этим отметим, что аналогичная проблема возникает и при любом ином выборе квантуемого потенциала, например в часто используемой модели параболического потенциала [13,14] или модели жестких стенок. Однако можно полагать, что результаты, относящиеся к уширению электронных уровней под влиянием разброса геометрических параметров КТ, являются достаточно надежными и в количественном отношении, поскольку связаны не с определением абсолютного положения электронных уровней, а лишь с их сдвигом по отношению друг к другу. Мы пренебрегаем эффектами анизотропии, наблюдающимися при получении КТ в реальных гетероэпитаксиальных системах, и считаем равновесную форму КТ сферической, а отклонения от нее в любом направлении одинаково вероятными. Отметим, что из-за анизотропии равновесная форма может отличаться от сферической; в частности, наблюдаются пирамидальные КТ [7,15]. Мы также не учитываем анизотропию законов дисперсии и различие эффективных масс зон проводимости материалов КТ и матрицы.

2. В однозонном приближении уравнение, описывающее квантовое состояние электрона в изолированной КТ, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где E и $\psi(\mathbf{r})$ — энергия и огибающая функция, m^* — эффективная масса, $V(\mathbf{r})$ — квантующий потенциал: $V(\mathbf{r}) = 0$ внутри КТ и $V(\mathbf{r}) = U_0$ вне КТ, U_0 — скачок дна зоны проводимости на гетерогранице. Использование стандартных граничных условий для огибающей функции позволяет в принципе определить энергетический спектр и волновые функции размерно-квантованных состояний электрона в одиночной КТ. Спектр состоит из ряда дискретных уровней размерного квантования, характерные расстояния между которыми можно грубо оценить по положению уровней в сферической потенциальной яме типичного для исследуемых КТ размера. Так, в гетеросистемах InAs–GaAs удается выращивать весьма совершенные в структурном отношении КТ, типичный размер которых R_0 составляет 10–15 нм при относительном разбросе, зачастую не превышающем 10%. Принимая во внимание типичные величины разрыва дна зоны проводимости и эффективной массы электрона ($U_0 \approx 300$ мэВ, $m^* \approx 0.1m_0$, где m_0 — масса свободного электрона), нетрудно найти, что расстояние между нижними уровнями размерного квантования в таких КТ составляет величину порядка $\hbar^2 \pi^2 / 8m^* R_0^2 \approx 60$ мэВ.

Будем описывать поверхность КТ уравнением в сферической системе координат, $r = R(\vartheta, \varphi)$, начало которой поместим в центр КТ, определяемый по аналогии с центром масс однородного тела. При таком выборе поверхность соответствующей сферической КТ описывается уравнением $r = R_0$, где R_0 — равновесный радиус КТ. Если ввести статистический ансамбль независимых КТ,

то функцию R следует считать случайной функцией своих аргументов. Мы ограничимся лишь самыми общими предположениями об ее статистических свойствах, в существенной степени определяемых видом одномерного $w(R|\vartheta, \varphi)$ и двумерного $w(R_1, R_2|\vartheta_1, \varphi_1, \vartheta_2, \varphi_2)$ законов распределения значений этой функции. Прежде всего, вследствие пренебрежения эффектами анизотропии, можно утверждать, что R является стационарной случайной функцией в смысле независимости ее свойств от углов ϑ и φ , что позволяет записать указанные законы распределения в более простой форме, соответственно как $w(R)$ и $w(R_1, R_2|\Omega)$, где Ω — угол между направлениями, задаваемыми углами ϑ_1, φ_1 и ϑ_2, φ_2 .

Функция $w(R)$, имеющая смысл одномерной плотности вероятности, описывает распределение КТ по размерам и характеризуется двумя основными параметрами массива КТ: математическим ожиданием \bar{R} и дисперсией D_R ,

$$R_0 = \bar{R} = \int_0^\infty R w(R) dR, \quad (2)$$

$$D_R = \int_0^\infty (R - R_0)^2 w(R) dR, \quad (3)$$

первый из которых есть средний (равновесный) радиус КТ, а второй определяет степень разброса КТ по размерам и может быть оценен по среднему квадратичному отклонению $\sigma_R = \sqrt{D_R}$. При достижимом в настоящее время качестве изготовления КТ σ_R может составлять величину $\approx 0.1R_0$, поэтому степень „размытости“ распределения $w(R)$ характеризуется малым безразмерным параметром $\sigma_R/R_0 \approx 0.1$.

Двумерная плотность распределения вероятности $w(R_1, R_2|\Omega)$ характеризует степень коррелированности значений функции R по любым двум направлениям, разнесенным на угловое расстояние Ω ($0 \leq \Omega \leq 2\pi$), и определяет тем самым характерный масштаб неровностей поверхности КТ. При максимально высокой степени корреляции значения функции R для всех углов ϑ и φ должны были бы совпасть, так что КТ имели бы одинаковую, строго сферическую, форму при сохранении статистического разброса по радиусам. Этот предельный случай абсолютной (полной) угловой корреляции описывает, таким образом, массив геометрически подобных КТ, и ему соответствует двумерная функция распределения

$$w(R_1, R_2|\Omega) = w(R_1) \delta(R_1 - R_2), \quad (4)$$

где $\delta(R_1 - R_2)$ — дельта-функция Дирака. В противоположном предельном случае всякая корреляция между значениями функции R при различных углах ϑ и φ отсутствует, и поверхность каждой КТ становится нерегулярной (стохастической), т. е. представляет собой хаотическое чередование узких резких выступов и впадин, высота и глубина которых совершенно некоррелированы

между собой и случайно распределены в соответствии с законом $w(R)$. Рассматриваемая ситуация соответствует, таким образом, массиву идентичных „иглообразных“ КТ с совершенно нерегулярной поверхностью и описывается двумерной функцией распределения

$$w(R_1, R_2|\Omega) = w(R_1)w(R_2). \quad (5)$$

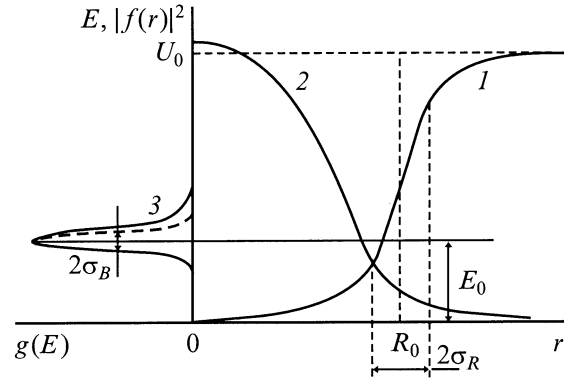
Ясно, что этот случай может рассматриваться лишь как математическая абстракция, но он важен для анализа влияния угловых корреляций на форму пика плотности состояний. Реальный процесс роста массива КТ обуславливает некоторую конечную степень корреляции, поэтому характеристики статистического уширения энергетических уровней КТ, такие как дисперсия, а также центральные моменты более высоких порядков, имеют значения, промежуточные по отношению к вычисленным в указанных предельных случаях. Между двумерной и одномерной функциями распределения имеет место соотношение, выполняющееся тождественно при любых Ω :

$$\int_0^\infty w(R_1, R_2|\Omega) dR_2 = w(R_1). \quad (6)$$

3. В силу флуктуаций формы гетерограницы потенциал КТ, $V(r, \vartheta, \varphi)$, входящий в (1), также является случайной функцией, принимающей в каждой точке одно из двух возможных значений: 0 или U_0 . Поэтому можно говорить о среднем (по статистическому ансамблю) потенциале

$$U(r) \equiv \bar{V} = \int_0^\infty U_0 \Theta(r-R) w(R) dR = U_0 \int_0^r w(R) dR, \quad (7)$$

где $\Theta(r-R)$ — ступенчатая функция Хевисайда, а черта над символом означает, как и всюду в дальнейшем, статистическое усреднение. Вследствие изотропности средний потенциал (7) не зависит от углов ϑ и φ и является функцией только переменной r . Эта функция, $U(r)$, в отличие от ступенчатого потенциала отдельной КТ плавно изменяется в узком интервале значений r шириной порядка σ_R вблизи R_0 , переходя от своего минимального значения, равного $U(0) = 0$, к максимальному значению $U(\infty) = U_0$ (см. рисунок). Будем называть $U(r)$ среднестатистическим потенциалом КТ. Отметим, что введение такого единого среднестатистического потенциала оправдано, если все КТ в массиве могут быть охарактеризованы одним типичным средним размером R_0 . В тех случаях, когда в силу изменяющихся условий роста, например при послойном выращивании массива КТ, или каких-либо иных причин характерный размер КТ изменяется по объему массива, целесообразно вводить в рассмотрение несколько типичных средних значений R_0 и соответствующее число функций распределения, каждой из которых отвечает свой среднестатистический потенциал.



Среднестатистическая потенциальная яма для электрона в массиве КТ (1), квадрат электронной огибающей волновой функции основного состояния (2) и плотность состояний, связанных с основным уровнем (3). Штриховой линией выделена симметричная часть пика плотности состояний.

Несферичность поверхности реальной КТ исключает возможность получения аналитического решения уравнения (1), однако если поверхность КТ в ансамбле отклоняется от равновесной сферической формы на небольшую (по сравнению с R_0) величину порядка σ_R , то для решения уравнения (1) можно воспользоваться теорией возмущений. Именно, выберем в качестве нулевого приближения положение энергетических уровней и волновые функции электрона в среднестатистической потенциальной яме (7), определяя их из уравнения Шредингера для частицы массой m^* , находящейся в потенциальном поле $U(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \chi + U(r) \chi = E \chi. \quad (8)$$

Состояния частицы в центрально-симметричном поле могут быть представлены в виде

$$\chi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = f_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (9)$$

где $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ — сферические гармоники, $f_{nl}(r)$ — нормированные радиальные волновые функции. Нормированная волновая функция основного состояния имеет вид

$$|\chi\rangle \equiv \chi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} f(r). \quad (10)$$

Обозначая энергию основного состояния электрона в среднестатистическом потенциале через E_0 , для энергии E основного электронного уровня в КТ с потенциалом $V(r, \vartheta, \varphi)$ в 1-м порядке теории возмущений найдем выражение

$$E = E_0 + \langle \chi | V - U | \chi \rangle, \quad (11)$$

где $\langle \chi | V - U | \chi \rangle$, как обычно, матричный элемент возмущения $V(r, \vartheta, \varphi) - U(r)$, вычисленный на волновых

функциях нулевого приближения:

$$\langle \chi | V - U | \chi \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \times \int_0^\infty f^2(r) r^2 [U_0 \Theta(r - R(\vartheta, \varphi)) - U(r)] dr. \quad (12)$$

Разность в квадратных скобках в (12) отлична от нуля лишь в узком интервале значений r шириной $\approx \sigma_R$ вблизи R_0 , в котором она меняет знак, поэтому можно ограничиться рассмотрением случая, когда матричный элемент (12) мал по сравнению с расстоянием между нижними уровнями размерного квантования в КТ. Действительно, даже в статистически маловероятном случае отклонения поверхности КТ от равновесной на максимальную величину $\approx \sigma_R$ выражение (12) не превосходит по модулю значения $U_0 \int_{R_0 - \sigma_R}^{R_0 + \sigma_R} f^2(r) r^2 dr$, которое мало ввиду малой вероятности для электрона в основном состоянии находиться вблизи границы потенциальной ямы в узком слое толщины $\sim \sigma_R$. Аналогичные соображения справедливы и для недиагональных элементов возмущения, что позволяет при рассмотрении статистического уширения основного уровня ограничиться 1-м порядком теории возмущений.

4. Ввиду случайного характера потенциала КТ, энергия E в (11) также является случайной величиной, закон распределений которой, $g(E)$, определяет форму максимума плотности электронных состояний, возникающего в результате неоднородного уширения δ -образного пика, связанного с основным электронным уровнем. Этот закон распределения можно найти, располагая значениями всех центральных моментов $\mu_E^{(k)}$ случайной величины E , которые легко вычисляются с помощью (11). Проводя в (11) усреднение и учитывая при этом, что $\bar{V} = U$, а функция χ — неслучайная величина, получим $\bar{E} = E_0$. Это означает, что пик $g(E)$ совпадает с основным электронным уровнем в среднестатистической потенциальной яме, поэтому для центрального момента k -го порядка величины E найдем

$$\mu_E^{(k)} = \overline{(E - \bar{E})^k} = \overline{\langle \chi | V - U | \chi \rangle^k}, \quad (13)$$

где черта в правой части равенства означает статистическое усреднение по многомерному закону распределения k -го порядка функции R .

Для дальнейшего удобно преобразовать (13), введя в рассмотрение вспомогательную случайную функцию F , связанную с R соотношением

$$F(R) = \int_0^R f^2(r) r^2 dr. \quad (14)$$

Как следует из (14), F определяет вероятность нахождения электрона в сферическом объеме радиуса R с

центром в начале координат и является монотонной функцией R . Преобразуя внутренний интеграл в (12) по частям, с учетом обращения в нуль внеинтегральных членов имеем

$$\mu_E^{(k)} = (-1)^k U_0^k \overline{\langle F - \bar{F} \rangle_{\vartheta, \varphi}^k}. \quad (15)$$

Здесь \bar{F} — среднее по распределению значение F ,

$$\bar{F} = \int_0^\infty F(R) w(R) dR, \quad (16)$$

а символом $\langle \dots \rangle_{\vartheta, \varphi}$ обозначено интегрирование (усреднение) по угловым переменным.

В случае полного отсутствия угловых корреляций в значениях функции R ее многомерные законы распределения распадаются, подобно (5), на произведения независимых одномерных распределений $w(R)$, благодаря чему статистическое усреднение в (15) можно производить для каждого из k сомножителей в отдельности, что приводит к обращению в нуль всех центральных моментов величины E . Этот вывод, как можно видеть, является общим и относится ко всем порядкам теории возмущений, поскольку в любом из них требуется усреднить произведение множителей вида $\langle \chi_{nlm} | V - U | \chi_{n'l'm'} \rangle$, где χ_{nlm} — неслучайные волновые функции электрона в среднестатистическом потенциале. В силу статистической независимости значений функции V в разных сомножителях, в каждом из них усреднение можно производить независимо друг от друга, что и приводит к обращению в нуль всех центральных моментов благодаря условию $\bar{V} = U$. Этот результат означает, что в случае такой полной стохастичности поверхности КТ положение уровней размерного квантования в ней в точности совпадает с их положением в среднестатистическом потенциале, в результате чего плотность состояний, связанная с основным электронным уровнем, имеет вид $g(E) = \delta(E - E_0)$, т.е. представляет собой δ -образный неуширенный пик при $E = E_0$.

Такое заключение представляется вполне естественным, если учесть, что в рассматриваемом случае, как отмечалось выше, все КТ идентичны друг другу, а наличие совершенно нерегулярных флуктуаций их поверхности приводит к совпадению уровней размерного квантования в них с энергетическими уровнями в среднестатистическом потенциале.

В предельном случае полной угловой корреляции между значениями функции R , последняя перестает зависеть от углов ϑ и φ , и по ним можно выполнить интегрирование в (12). Преобразуя оставшийся интеграл по r по частям, приходим к соотношению

$$E = E_0 - U_0(F(R) - \bar{F}), \quad (17)$$

означающему наличие взаимно однозначной функциональной зависимости между случайными величинами R

и E . Отсюда для функции $g(E)$ получаем выражение

$$g(E) = \frac{1}{U_0} \frac{w(R)}{f^2(R)R^2} \Big|_{R=R(E)}, \quad (18)$$

в правой части которого R нужно рассматривать как функцию E , определяемую из (17).

При оценке числовых характеристик распределения (18) учтем, что, ввиду сравнительно небольшого разброса значений R в пределах узкого интервала вблизи R_0 , в преобразовании (17) от R к E задействован лишь небольшой участок функции F , в пределах которого ее можно считать линейной. Заменяя в связи с этим в (17) F двумя членами ее разложения в ряд Тейлора в окрестности точки R_0 , получаем линеаризованную форму (17), из которой немедленно вытекает, что

$$\mu_E^{(k)} = (-1)^k U_0^k (f^2(R_0)R_0^2)^k \mu_R^{(k)}, \quad (19)$$

где $\mu_R^{(k)}$ — центральный момент k -го порядка функции R :

$$\mu_R^{(k)} = \int_0^{\infty} (R - R_0)^k w(R) dR. \quad (20)$$

Таким образом, в случае полной угловой корреляции центральные моменты распределения по энергии пропорциональны соответствующим моментам радиального распределения КТ по размерам, а плотность состояний определяется выражением (18) и имеет вид пика конечной ширины, форма которого, в рамках сделанных приближений, повторяет форму распределения $w(R)$. Отметим, что подобный результат для кривой спектра оптического усиления лазеров на КТ был получен ранее [16] в связи с анализом влияния флуктуаций размера КТ на характеристики таких лазеров. Проводимое в [16] однопараметрическое статистическое усреднение по относительному отклонению размера КТ от его среднего (равновесного) значения полностью соответствует рассматриваемому случаю полной угловой корреляции. Ширина пика плотности состояний характеризуется дисперсией, величина которой находится из (19):

$$\sigma_E = \sqrt{D_E} = U_0 f^2(R_0) R_0^2 \sigma_R. \quad (21)$$

В случае достаточно глубокой потенциальной ямы $U(r)$ шириной порядка десятка нанометров плотность вероятности $f^2(R_0)R_0^2$ нахождения электрона вблизи ее границы мала. Как показывает приводимый далее расчет, она не превышает величины $\approx 0.1R_0^{-1}$, поэтому $\sigma_E/U_0 \leq 0.1\sigma_R/R_0$, так что распределение $g(E)$ имеет форму узкого пика, ширина которого определяется относительным разбросом КТ по размерам и составляет величину, малую по сравнению с расстоянием между уровнями размерного квантования. Как следует из (19), моменты 3-го порядка $\mu_R^{(3)}$ и $\mu_E^{(3)}$, характеризующие асимметрию соответствующих распределений, противоположны по знаку. Это соответствует тому, что уровни размерного квантования понижаются с ростом размера КТ.

5. При произвольной угловой корреляции определение числовых характеристик распределения $g(E)$, согласно (13), требует знания многомерных законов распределения функции R соответствующих порядков. Получаемые при этом значения центральных моментов являются промежуточными по отношению к их значениям, найденным в рассмотренных предельных случаях:

$$|\mu_E^{(k)}| \leq U_0^k (f^2(R_0)R_0^2)^k |\mu_R^{(k)}|. \quad (22)$$

Соответственно функция $g(E)$ в этом случае имеет форму пика, более высокого и узкого, чем при полной угловой корреляции.

Для оценки дисперсии воспользуемся формулой (15) для $k = 2$, в которой функцию F можно заменить двумя первыми членами ее разложения в ряд Тейлора в окрестности точки R_0 , что приводит к соотношению

$$D_E = U_0^2 \frac{[f^2(R_0)R_0^2]^2}{(4\pi)^2} \times \iint \frac{d\vartheta_1 d\varphi_1 d\vartheta_2 d\varphi_2}{(R(\vartheta_1, \varphi_1) - R_0)(R(\vartheta_2, \varphi_2) - R_0)} d\vartheta_1 d\varphi_1 d\vartheta_2 d\varphi_2, \quad (23)$$

в котором $d\vartheta_i = \sin \vartheta_i d\vartheta_i d\varphi_i$, $i = 1, 2$, а каждое интегрирование проводится по полному телесному углу. Входящее в (23) среднее есть корреляционная функция стационарной случайной функции R , зависящая только от угла Ω между направлениями, определяемыми углами ϑ_1, φ_1 и ϑ_2, φ_2 . Вводя в рассмотрение безразмерную нормированную корреляционную функцию $k(\Omega)$,

$$k(\Omega) = \frac{1}{D_R} \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} (R_1 - R_0)(R_2 - R_0) w(R_1, R_2|\Omega) dR_1 dR_2, \quad (24)$$

удовлетворяющую условию $|k(\Omega)| \leq 1$, и выполняя в (23) интегрирование по части угловых переменных, окончательно получим

$$D_E = U_0^2 (f^2(R_0)R_0^2)^2 D_R \frac{1}{2} \int_0^{\pi} k(\Omega) \sin \Omega d\Omega. \quad (25)$$

Ввиду того что $|k(\Omega)| \leq 1$, дисперсия распределения $g(E)$ удовлетворяет общему условию (22). В случае полной угловой корреляции, когда $k(\Omega) \equiv 1$, мы возвращаемся к (21). При полном отсутствии угловых корреляций $D_E = 0$, поскольку $k(\Omega) \equiv 0$. Таким образом, увеличение угловых корреляций при сохранении неизменным разброса по размерам должно приводить к увеличению ширины пика плотности состояний.

Для определения функции $g(E)$ можно воспользоваться разложением последней в ряд по полиномам Эрмита [17]

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_E} \exp(-\xi^2) \left(1 + \sum_3^{\infty} b_k H_k(\xi) \right), \quad (26)$$

где $\xi = (E - \bar{E})/\sqrt{2} \sigma_E$, $H_k(\xi)$ — полином Эрмита k -го порядка, а коэффициенты b_k могут быть выражены

через центральные моменты $\mu_E^{(k)}$, исходя из соотношения

$$b_k = \frac{1}{2^k k!} \int_{-\infty}^{\infty} g(E) H_k \left(\frac{E - \bar{E}}{\sqrt{2} \sigma_E} \right) dE, \quad (27)$$

в котором интегрирование распространено на всю числовую ось ввиду того, что $g(E)$ равно нулю почти всюду, за исключением узкого интервала значений шириной $\approx \sigma_E$ вблизи \bar{E} . Когда закон распределения $g(E)$ мало отличается от нормального, в разложении (26) достаточно [17] удержать только первые три члена:

$$g(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_E} \exp(-\xi^2) \times \left\{ 1 + \frac{1}{12\sqrt{2}} \frac{\mu_E^{(3)}}{\sigma_E^3} H_3(\xi) + \frac{1}{96} \left(\frac{\mu_E^{(4)}}{\sigma_E^4} - 3 \right) H_4(\xi) \right\}, \quad (28)$$

где второе и третье слагаемые в фигурных скобках описывают [17] асимметрию и эксцесс.

Отметим, что ввиду нелинейности преобразования от R к E определенная асимметрия энергетического спектра может иметь место и при весьма симметричном характере исходного распределения $w(R)$, когда $\mu_R^{(3)} = 0$. Например, выбрав $w(R)$ в гауссовом виде и ограничившись случаем полной гауссовой корреляции, в квадратичном по разности $(R - R_0)$ приближении из (15) найдем

$$\mu_E^{(3)} = -U_0^3 \frac{d}{dR_0} \left[(f^2(R_0) R_0^2)^3 \right] D_R^2. \quad (29)$$

Как отмечено выше, нелинейность преобразования от R к E сравнительно слаба, так что во всех случаях, когда $w(R)$ близко к гауссовому закону, распределение $g(E)$ также мало отличается от нормального и достаточно точно может описываться выражением (28).

б. Приближенное значение энергии основного состояния E_0 и волновая функция $f(r)$ электрона в среднестатистическом потенциале могут быть найдены основанным на теории возмущений методом [18], который заключается в подборе такой сферической прямоугольной потенциальной ямы глубины U_0 , чтобы обеспечить наилучшее приближение к $U(r)$. Именно, обозначая через $E_0(R_s)$ и $f_s(r)$ энергию основного состояния и соответствующую волновую функцию электрона в сферической прямоугольной потенциальной яме радиуса R_s , в 1-м порядке теории возмущений найдем

$$E_0 = E_0(R_s) + \int_0^{\infty} f_s^2(r) r^2 [U(r) - U_0 \Theta(r - R_s)] dr. \quad (30)$$

Выберем R_s из условия, чтобы поправка 1-го порядка к энергии обращалась в нуль. Тем самым будет достигнуто наилучшее сближение формы потенциалов $U(r)$ и $U_0 \Theta(r - R_s)$, поскольку, как отмечено выше, поправками 2-го и высших порядков можно пренебречь.

Полагая, что R_s выбрано указанным образом, найдем $E_0 = E_0(R_s)$, при этом в качестве функции $f(r)$ можно взять волновую функцию нулевого приближения $f_s(r)$. Для определения R_s из условия обращения в нуль интеграла в (30), преобразуем последний по частям. Учитывая малую ширину распределения $w(R)$, в первом приближении $R_s \cong R_0$; это соотношение выполняется тем точнее, чем меньше дисперсия D_R .

Таким образом, задача об определении энергии и волновой функции электрона для основного состояния в среднестатистическом потенциале сводится к нахождению соответствующих величин для электрона в сферической прямоугольной яме глубины U_0 и радиуса R_0 . Используя для оценок значения параметров, типичные для КТ в системе InAs-GaAs, для плотности вероятности $f^2(R_0) R_0^2$ нахождения электрона вблизи $r = R_0$ получим значение порядка $0.1 R_0^{-1}$, уже приведенное ранее.

7. Разброс КТ по размерам и форме заметным образом сказывается на характере плотности электронных состояний в системе нетождественных изолированных КТ, приводя к преобразованию δ -образных особенностей в пики, форма и положение которых зависят от статистических характеристик массива КТ. В частности, плотность состояний вблизи основного электронного уровня представляет собой асимметричный пик, центрированный на энергию основного состояния электрона в среднестатистическом потенциале, профиль которого определяется распределением КТ по радиальному размеру. Ширина пика зависит как от радиального распределения, так и от степени коррелированности формы поверхности КТ по разным направлениям, увеличиваясь от нуля (в отсутствие корреляции) до максимального значения, соответствующего предельной степени корреляции, когда все КТ в массиве становятся геометрически подобными. Асимметрия пика плотности состояний обусловлена как старшими моментами в распределении КТ по радиальному размеру, так и непосредственно зависимостью сдвига электронного уровня от величины и знака отклонения размера КТ от равновесного.

Работа поддержана МНТП России „Физика твердотельных наноструктур“.

Список литературы

- [1] S.S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Richter, U. Gosele, J. Heydenreich, N.N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, P.S. Kor'ev, Zh.I. Alferov. Phys. Rev. B, **51**, 14 766 (1995).
- [2] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, С.В. Иванов, Б.Я. Мельцер, М.В. Максимов, П.С. Копьев, Д. Бимберг, Ж.И. Алфёров. УФН **166**, 423 (1996)
- [3] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C.M. Reaves, S.P. Denbaars, P.M. Petroff. Appl. Phys. Lett., **63**, 3203 (1993).
- [4] J.M. Moison, F. Houzay, F. Barthe, L. Leprince, E. Andre, O. Vatel. Appl. Phys. Lett., **64**, 196 (1994).

- [5] N.N. Ledentsov, M. Grundmann, N. Kirstaedter, O. Schmidt, R. Heitz, J. Boher, D. Bimberg, V.M. Ustinov, V.A. Shchukin, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov, S.S. Ruvimov, A.O. Kosogov, P. Werner, U. Richter, U. Gosele, J. Heydenreich. *Proc. 7th Int. Conf. Modulated Semicond. Struct.* (Madrid, Spanish, 1995). [*Sol. St. Electron.*, **40**, 785 (1996)].
- [6] Г.Э. Цырлин, В.Н. Петров, М.В. Максимов, Н.Н. Леденцов. *ФТП*, **31**, 912 (1997).
- [7] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алферов, Д. Бимберг. *ФТП*, **32**, 385 (1998).
- [8] В.Г. Талалаев, Б.В. Новиков, С.Ю. Вербин, А.Б. Новиков, Динь Шон Тхак, Г. Гобш, Р. Гольдхан, Н. Штейн, А. Голомбек, Г.Э. Цырлин, В.Н. Петров, В.М. Устинов, А.Е. Жуков, А.Ю. Егоров. *ФТП*, **34**, 467 (2000).
- [9] H. Sakaki, G. Yusa, T. Someya, Y. Ohno, T. Noda, H. Akiyama, Y. Kadoya, H. Noge. *Appl. Phys. Lett.*, **67**, 3444 (1995).
- [10] А.Е. Жуков, А.Р. Ковш, В.М. Устинов. *ФТП*, **33**, 1395 (1999).
- [11] M. Altarelli. *Springer Proc. In Physics*, ed. by R. Del Sole, A. D'Andrea and A. Lapicciarella (Springer Verlag, Berlin etc., 1988) v. 15, p. 170.
- [12] V.A. Shchukin, A.I. Borovkov, N.N. Ledentsov, P.S. Kop'ev, M. Grundmann, D. Bimberg. *Phys. Low-Dim. Structur.*, **12**, 43 (1995).
- [13] U.E.H. Laheld, F.B. Pedersen, P.S. Hemmer. *Phys. Rev. B*, **52**, 2697 (1995).
- [14] Н.Е. Капуткина, Ю.Е. Лозовик. *ФТТ* **40**, 2127 (1998).
- [15] N.N. Ledentsov, M.V. Maximov, P.S. Kop'ev, V.M. Ustinov, M.V. Belousov, B.Ya. Meltser, S.V. Ivanov, V.A. Shchukin, Zh.I. Alferov, M. Grundmann, D. Bimberg, S.S. Ruvimov, U. Richter, P. Werner, U. Gosele, U. Heidenreich, P.D. Wang, C.M. Sotomayor Torres. *Microelectron. J.*, **26**, 871 (1995).
- [16] L.V. Asryan, R.A. Suris. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 554 (1996).
- [17] А.А. Свешников. *Прикладные методы теории случайных функций* (М., Наука, 1968).
- [18] Y.C. Lee, W.N. Mei, K.C. Lin. *J. Phys. C*, **15**, L469 (1982).

Редактор Л.В. Беляков

A nonuniform broadening of ground state electron level in quantum dot array

V.I. Belyavsky, S.V. Shevtsov

Voronezh State Pedagogical University,
394043 Voronezh, Russia

Abstract An interrelationship has been considered between the quantum dot shape and size distribution and the electron density of states. It is shown that, in the case of an array of not identical quantum dots, density of states in the vicinity of the ground state level has the form of an asymmetrical peak, the energy and shape of which is determined by certain statistical parameters of the quantum dot array such as an equilibrium radius and the dispersion and asymmetry of quantum size distribution. Established are general relations between the peak shape and the above mentioned parameters.