

# Структура энергетических квантовых уровней в квантовой точке, имеющей форму сплюснутого тела вращения

© Г.Г. Зегря, О.В. Константинов, А.В. Матвеев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 2 июля 2002 г. Принята к печати 4 июля 2002 г.)

Показано, что энергетический спектр электрона в потенциальной яме дискообразной формы имеет уровни двух типов: первый тип характеризуется квантовым числом, соответствующим движению носителя в основном вдоль короткого измерения диска. Расстояния между такими уровнями оказываются большими. В квантовой точке состава InAs и в обкладках GaAs у электронов помещается, как правило, лишь один такой уровень. Уровни второго типа образуют субструктуру с квантовыми числами, соответствующими вращению носителя вокруг полярной оси и движению вдоль длинной оси диска. Расстояния между такими уровнями оказываются относительно малыми. Теория позволяет определить число таких уровней как функцию толщины и диаметра диска и установить условия перехода квантовой точки в квантовую яму с большим числом уровней субструктуры.

## 1. Введение

Хорошо известно, что массивы квантовых точек (КТ) обладают преимуществами перед квантовыми ямами в плане их использования в качестве активной лазерной среды [1]. Предполагается, что в идеальной квантовой точке помещается один квантовый уровень. Для этого форма кластера, образующего подобную квантовую точку, должна быть компактной, такой как сфера, куб и т.п. Однако экспериментальные наблюдения массивов квантовых точек InAs на подложке GaAs показывают, что квантовые точки арсенида индия представляют собой сильно сплюснутые дискообразные кластеры, у которых в принципе может быть множество уровней. Если диск имеет достаточно большой диаметр, то он будет представлять собой фрагмент квантовой ямы, у которого зоны поперечного движения расщепляются в субструктуру уровней. В настоящей работе проводится качественное исследование множественности подобной субструктуры. С этой целью рассмотрены две модели, которые позволяют получить аналитическое решение для энергии электрона в дискообразном объекте при параболическом законе дисперсии в InAs. Одна модель относится к кластеру, имеющему форму эллипсоида вращения (рис. 1, *a*). Для нее в работе развит метод построения квазисферической системы эллипсоидальных координат, которая допускает полное разделение переменных, как это имеет место в сферической системе координат. Введение ортогональной квазисферической системы справедливо, однако, лишь для достаточно большой степени сплюснутости, т.е. отношения большей оси эллипсоида к малой. Известные эллипсоидальные координаты, описанные, например, в [2], не допускают полного разделения переменных, поскольку две координаты, аналогичные радиусу и полярному углу, остаются зацепленными. Однако для актуального случая идеальной КТ с одним уровнем сплюснутость эллипсоида может быть и не сильной. Поэтому для обоснования при-

менимости квазисферической системы при небольшой сплюснутости мы используем цилиндрическую модель КТ, которая допускает точное решение. В этом случае КТ представляет собой фрагмент квантовой ямы (КЯ), который получается путем вырезания из КЯ непроницаемой для носителей цилиндрической поверхности. На рис. 1, *b* изображен такой цилиндр. Граничные условия на торце цилиндра имеют тот же вид, что и в квантовой яме, а на боковой его поверхности волновая функция считается равной нулю. Тогда в цилиндрической системе координат переменные разделяются, что приводит к простому точному решению для энергетического спектра. Это дает основание для того, чтобы отбросить одно из решений квазисферического приближения. Волновая функция такого решения постоянна по полярному углу, и такое состояние является наименьшим по энергии. Как показывает сравнение с точным решением для цилиндра, такое решение является лишним, и его не следует принимать во внимание, поскольку оно является вследствие неприменимости квазисферического приближения при небольшой степени сплюснутости.

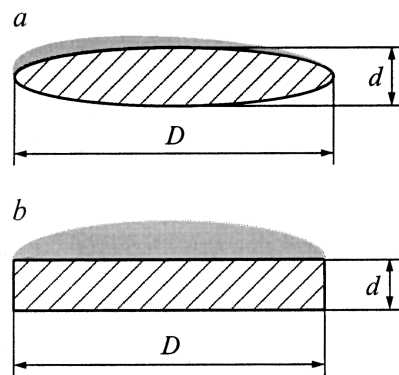


Рис. 1. Поперечные разрезы сплюснутых тел вращения с диаметром  $D$  и максимальной высотой  $d$ : *a* — эллипсоид; *b* — цилиндр (таблетка).

## 2. Квантовые уровни в цилиндрической КТ

Рассмотрим уравнение Шредингера при параболическом законе дисперсии электрона:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

где  $m$  — эффективная масса носителя в материале КТ. Лапласиан в цилиндрической системе координат имеет вид

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left( R \frac{\partial \Psi}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2}. \quad (2)$$

Будем искать волновую функцию в виде произведения трех функций:

$$\Psi = \exp(iM\varphi) \cdot J_M(pR) \cos(kz), \quad (3)$$

где  $J_M(pR)$  — функция Бесселя, а  $k$  и  $p$  связаны с энергией  $E$ :

$$E = E(k) + E(p), \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad E(p) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}. \quad (4)$$

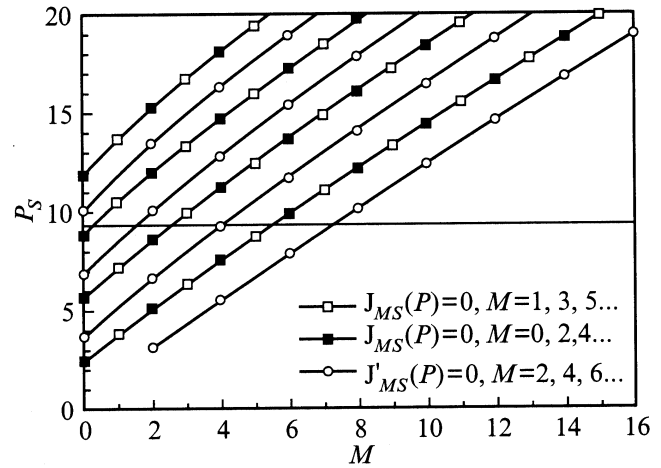
Индекс функции Бесселя  $M$  должен быть целым ( $M = 0, 1, 2, 3, \dots$ ) ввиду периодичности волновой функции по углу  $\varphi$ . Первое слагаемое,  $E(k)$  — это энергия уровней для движения электрона по оси  $z$ , которое описывается волновой функцией  $\cos(kz)$ . Спектр энергий имеет большие расстояния между уровнями и находится из известного уравнения для квантовой ямы:

$$\text{tg}(ka) = \frac{q}{k}, \quad q^2 = \frac{2m_B}{\hbar^2} [\Delta E - E(k)], \quad (5)$$

где  $a = d/2$  — половина толщины цилиндра,  $m_B$  — масса для электронов и дырок в GaAs,  $q$  — показатель спада экспоненты в GaAs. Решение (5) характеризуется номером  $f$ . В нашем примере величины соответствующих потенциальных ступеней на гетерогранице при  $T = 0$  К будут  $\Delta E_c = 0.70$  эВ,  $\Delta E_v = 0.38$  эВ. Возьмем эффективные массы электрона и дырки в арсениде индия  $m_c = 0.027m_0$ ,  $m_v = 0.41m_0$ , а в арсениде галлия  $m_{cB} = 0.065m_0$ ,  $m_{vB} = 0.45m_0$ . Тогда решение уравнения (5) дает  $ka = 0.730$  при толщине цилиндра  $24 \text{ \AA}$  и  $ka = 0.850$  при толщине цилиндра  $30 \text{ \AA}$ . Этим толщинам соответствуют энергии  $E(k) = 0.523$  эВ и  $E(k) = 0.453$  эВ. Энергетические зазоры

$$I(k) = \Delta E - E(k) \quad (6)$$

определяют величины интервалов для энергий  $E(p)$ , соответствующих движению, поперечному к оси цилиндра. Волновой вектор  $p$  определяется граничным условием непроницаемости боковой стенки при  $R = b = D/2$  для



**Рис. 2.** Зависимости значений корней функций Бесселя или их производных от порядка  $M$ . Параметром кривой является номер корня. Квадраты относятся к корням самих функций Бесселя: пустые — к четным, а зачеркнутые — к нечетным. Кружки относятся к корням производных функций Бесселя с четным индексом. Число пустых значков, лежащих ниже линии отсечки, равно числу уровней в эллипсоиде, а число квадратиков (пустых и заполненных) — числу уровней в цилиндре.

электронов и дырок:

$$J_M(pb) = 0. \quad (7)$$

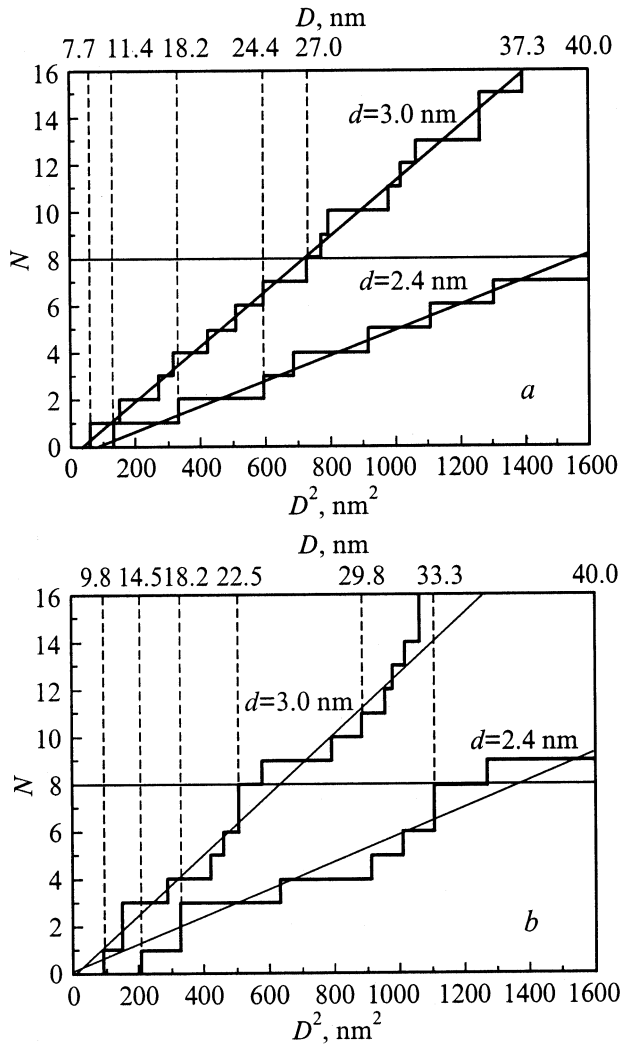
Слагаемое  $E(p)$  описывает субструктуру энергетических уровней. Решение уравнения (7)

$$P = p \cdot b \quad (8)$$

описывается диаграммой на рис. 2. По оси абсцисс отложен порядок  $M$  функции Бесселя, а по оси ординат — величина  $P$ . Квадратиками обозначены корни функции Бесселя, причем заполненные квадратики относятся к четным  $M$ , а пустые — к нечетным. Сплошная кривая соединяет все квадратики с фиксированным номером  $S$  корня  $P_S$  функции Бесселя. Подобные кривые построены на рис. 126–128 в справочнике [3]. Заметим, что номер  $S$  является третьим квантовым числом задачи в наборе  $(f, M, S)$ . Мы нашли, что кривая зависимости  $P_S(M)$  может быть описана следующей приближенной формулой

$$P_S(M) = M - 1 + 3S + \sqrt{S(0.55M + 0.2)}, \quad M = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (9)$$

где  $S = 1, 2, 3, \dots$ . Эти формулы не дают ошибки при определении числа состояний, тогда как сами корни получаются с погрешностью порядка немногих процентов при малых  $M$  и  $S$  и долей процентов при больших. Итак, основная структура характеризуется квантовым числом  $f$ , а субструктура зависит от двух квантовых чисел —  $M$  и  $S$ .



**Рис. 3.** Зависимости числа электронных уровней  $N$  от квадрата диаметра для кластера InAs в матрице GaAs в параболическом приближении для энергетического спектра электронов в InAs в случаях:  $a$  — цилиндра;  $b$  — эллипсоида. Верхние кривые относятся к толщине  $d = 3$  нм, нижние — к толщине  $d = 2.4$  нм.

Число уровней в КТ с данным диаметром  $D$  определяется ординатой линии отсечки  $P$ , которая параллельна оси абсцисс. Значение ординаты линии отсечки дается следующей формулой:

$$P = \frac{D}{2\hbar} \sqrt{2mI(k)}, \quad (10)$$

где  $I(k)$  — энергетический зазор, определяемый формулой (6). При толщине  $d = 30 \text{ \AA}$  и диаметре  $D = 300 \text{ \AA}$ , когда  $I = 0.25$  эВ, получаем величину  $P = 9.35$ , что дает 10 уровней в цилиндрической КТ. По указанной схеме с помощью диаграммы на рис. 2 строятся гистограммы полного числа уровней в цилиндре, изображенные на рис. 3,  $a$ .

### 3. Введение эллипсоидальных криволинейных координат

Пусть форма поверхности КТ задается следующим уравнением эллипсоида вращения:

$$\frac{x^2 + y^2}{b^2} + \frac{z^2}{r^2} = 1, \quad b = n \cdot r, \quad (11)$$

где  $r$  — малая полуось эллипсоида,  $b$  — его большая полуось, через  $n$  обозначена степень сплюснутости. Введем квазисферическую систему координат, в которой поверхность эллипсоида будет иметь вид сферы  $r = \text{const}$ , вписанной в исходный эллипсоид вращения:

$$x = n \cdot r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi, \quad y = n \cdot r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi, \quad z = r \cdot \cos \theta. \quad (12)$$

Эта система криволинейных координат не ортогональна. Чтобы убедиться в этом, следует записать квадрат элемента длины:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (13)$$

где  $dx, dy, dz$  — дифференциалы декартовых координат, связанные с криволинейными координатами  $r, \theta, \varphi$  соотношениями (12). Вычисляя квадрат дифференциала длины, получим его в следующей форме:

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + n^2 r^2 \sin^2 \theta \cdot d\varphi^2 + (n^2 - 1) \times [\sin \theta \cdot dr + r \cdot \cos \theta \cdot d\theta]^2. \quad (14)$$

Из этой формулы видно, что криволинейные координаты  $r$  и  $\theta$  ортогональны друг другу при  $n = 1$ . Однако можно увидеть, что криволинейные координаты становятся ортогональными также и при  $n \gg 1$ . Для этого сделаем замену переменных, введя вместо полярного угла  $\theta$  цилиндрический радиус  $\rho$ :

$$\rho = r \cdot \sin \theta; \quad d\rho = \sin \theta \cdot dr + r \cos \theta \cdot d\theta. \quad (15)$$

Тогда получим

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + n^2 \rho^2 d\varphi^2 + (n^2 - 1) d\rho^2. \quad (16)$$

Член  $r^2 d\theta^2$  следует выразить через дифференциалы  $dr$  и  $d\rho$ . Мы однако, рассмотрим предельный случай сильно сплюснутого эллипсоида,  $n \gg 1$ . Тогда членом  $r^2 d\theta^2$  можно вообще пренебречь, и криволинейные координаты  $r, \rho, \varphi$  становятся ортогональными, поскольку квадрат длины дуги не содержит перекрестных произведений дифференциалов криволинейных координат:

$$ds^2 = dr^2 + n^2 d\rho^2 + n^2 \rho^2 d\varphi^2. \quad (17)$$

Перед квадратами дифференциалов криволинейных координат в формуле (17) стоят квадраты коэффициентов Ламе [4]. В этих координатах они будут иметь вид

$$H_r = 1; \quad H_\rho = n; \quad H_\varphi = n\rho. \quad (18)$$

С помощью коэффициентов Ламе нетрудно построить лапласиан для сильно сплюснутого эллипсоида ( $n \gg 1$ ).

Следуя способу, приведенному в [5], получим следующее выражение для лапласиана:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{n^2} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (19)$$

Этот оператор похож на лапласиан (2) цилиндрической системы координат с заменой  $z \rightarrow r$ ,  $R \rightarrow n \cdot \rho$ . Такой же вид будет иметь лапласиан вне ямы. Отметим, что вывод оператора (19) из исходного оператора кинетической энергии в декартовой системе координат возможен только для изотропного квадратичного закона дисперсии электрона, т. е. в параболическом приближении.

#### 4. Разделение переменных в квазисферических координатах

Решение уравнения Шредингера (1) с лапласианом (19) будет иметь вид, аналогичный (3):

$$\Psi = \exp(iM\varphi) \cdot J_M(pn\rho) \cos(kr). \quad (20)$$

Здесь  $k$  и  $p$  — дискретные компоненты волнового вектора, значения которых определяются граничными условиями данной задачи. Граничные условия по переменной  $r$  состоят в непрерывности волновой функции и ее производной по нормали на поверхности сферы  $r = a$ , что приводит к уравнению (5), такому же, как и в случае квантовой ямы. Граничные условия по переменным  $\varphi$  и  $\rho$  являются условиями цикличности волновой функции. Ввиду периодичности волновой функции по переменной  $\varphi$  квантовое число  $M$  должно быть целым:  $M = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Энергия  $E$ , аналогично (4), является суммой двух слагаемых. Первое слагаемое,  $E(k)$  — это энергия уровней, соответствующих движению носителя по радиусу  $r$ . Спектр этих энергий, даваемый уравнением (5), будет основной структурой, которая имеет большие расстояния между уровнями. Второе слагаемое,  $E(p)$ , описывает субструктуру уровней и соответствует движению носителя как по углу  $\varphi$ , так и по углу  $\theta$ . Обсудим условия цикличности по  $\theta$ , для этого изменим начало отсчета полярного угла. Введем вместо переменной  $\theta$  переменную  $\theta'$ :  $\theta' = \frac{\pi}{2} - \theta$ ,  $\rho = r \cos \theta'$ . Пределы изменения переменных будут следующие:  $-\pi/2 < \theta' < \pi/2$ ,  $-a < \rho < a$ . Если  $M$  четное, то решение будет описывать четную функцию  $\Psi(\rho) = \Psi(-\rho)$ . Тогда граничное условие при  $\theta' = \pi/2$  ( $\rho = 0$ ) состоит в том, что производная должна быть непрерывной. Поскольку функция должна быть четной по углу  $\theta'$ , то производная должна обратиться в нуль при  $\theta' = \pi/2$ , т. е. при  $\rho = 0$ , иначе функция будет иметь излом. Если  $M$  нечетное, то решение будет описывать нечетную функцию  $\Psi(\rho) = -\Psi(-\rho)$ . Итак, получаем следующие дисперсионные уравнения:

$$J'_M(P) = 0, \quad M = 0, 2, \dots; \quad J_M(P) = 0, \quad M = 1, 3, \dots \quad (21)$$

Каждый корень характеризуется номером  $S$ :  $P \equiv P_S(M)$ ,  $S = 1, 2, 3, \dots$ . Первые корни будут следующими:

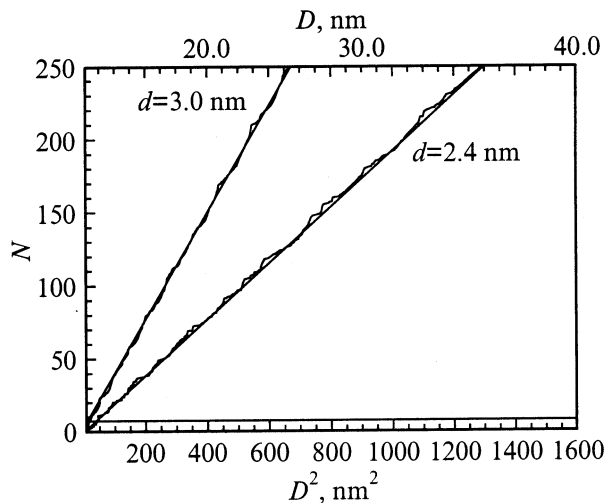
$P_1(0) = 0$ ,  $P_1(2) = 3.05$ ,  $P_2(0) = P_1(1) = 3.83$ ,  $P_1(4) = 5.32$ ,  $P_1(3) = 6.38$  [6]. Важно подчеркнуть, что уравнение для производной имеет нулевой корень,  $P_1(0) = 0$ , которому будет соответствовать энергия, равная нулю для движения вдоль длинной оси. Как упоминалось выше, этот корень — лишний, и в дальнейшем случай с  $M = 0$  будет отброшен. Для упрощения процедуры определения корней уравнений (21) приведем приближенную формулу для безразмерных корней производной функции Бесселя  $P_{S'}(M)$ :

$$P_{S'}(M) = M - 3.1 + 3.07S' + \sqrt{S'(0.55M + 0.2)}, \quad M = 2, 4, \dots \quad (22)$$

Для нечетных значений  $M$  корень определяется формулой (9). Эти формулы не дают ошибки при определении числа состояний (см. рис. 2), тогда как сами корни при малых  $M$  и  $S(S')$  получаются с некоторой погрешностью. В этих случаях точные значения корней приведены выше. Каждая кривая на рис. 2 соответствует определенному номеру корня  $S$ ,  $S' = 1, 2, 3$ . Таким образом, корни уравнений (21) описываются кружками и зачерненными квадратиками. Последние являются также и решениями уравнения (7).

#### 5. Результаты расчетов

Для указанных моделей они представлены на рис. 3, *a, b*. На рис. 3, *a* дана зависимость числа электронных уровней  $N$  в цилиндрической КТ от квадрата диаметра цилиндра. Зависимость представляет собой гистограмму, поскольку число уровней есть дискретная величина. Если по оси абсцисс откладывать квадраты диаметра, то оказывается, что медиана гистограммы будет прямой линией. Более того, при  $N > 100$  зависимость  $N(D^2)$  практически не отличается от этой прямой. Такой факт имеет простой физический смысл — число уровней просто пропорционально площади диска. Для удобства на верхней, вспомогательной оси абсцисс отложен диаметр. Нижняя гистограмма относится к толщине цилиндра 2.4 нм, а верхняя — к толщине 3.0 нм. Диаметры, соответствующие возникновению одного, двух и трех уровней, проектируются штриховыми линиями на верхнюю ось абсцисс в точках 11.4, 18.2, 24.4 нм для толщины цилиндра 2.4 нм. Восемь уровней возникают при диаметре 40 нм. Идеальная квантовая точка с одним квантовым уровнем существует только в диапазоне диаметров от 114 до 182 Å. Заметим, что эти выводы являются скорее иллюстративными, чем строго количественными, вследствие того, что использовалось параболическое приближение для закона дисперсии электронов в InAs. Если рассматривать более высокий цилиндр с толщиной 30 Å, то диапазон диаметров идеальной квантовой точки уменьшается и будет расположен в интервале от 77 до 116 Å. Поэтому условие существования идеальной КТ критическим образом зависит



**Рис. 4.** Зависимости числа дырочных уровней  $N$  от квадрата диаметра для кластера InAs в матрице GaAs при параболическом приближении энергетического спектра дырок в InAs в случае эллипсоида. Верхняя кривая относится к толщине  $d = 3$  нм, нижняя — к толщине  $d = 2.4$  нм. Эффективная масса дырки в InAs  $m = 0.41m_0$  и  $m = 0.45m_0$  в GaAs. Разрыв зоны  $\Delta E_v = 0.38$  эВ.

от диаметра и, в особенности, от толщины цилиндра. На рис. 3, *b* изображены аналогичные гистограммы для эллипсоида вращения. Идеальной КТ будет эллипсоид с диаметром в диапазоне от 145 до 182 Å при толщине 24 Å. В случае толщины 30 Å этот диапазон уменьшается и будет расположен от 96 до 120 Å, что подтверждает вышевысказанный вывод о критической зависимости числа уровней субструктуры КТ от толщины. Физический смысл такой зависимости заключается в том, что при увеличении толщины КТ уровень, соответствующий движению носителя вдоль короткого направления, заглубляется, и в энергетическом интервале от этого уровня до края сплошного спектра может поместиться больше уровней субструктуры. Завершая обсуждение вопроса о множественности уровней, можно сказать, что, когда уровней субструктуры много, все преимущества квантовой точки перед квантовой ямой будут утеряны. Кроме того, тогда возникнут еще и другие недостатки, связанные с большим числом носителей внутри КТ, поскольку плотность носителей в КТ может быть выше, чем в КЯ. При высокой степени заселенности квантовой точки носителями будет быстро нарастать скорость оже-рекомбинации носителей в КТ с ростом размеров КТ. Вследствие этого квантовый выход излучательной рекомбинации будет уменьшаться с ростом числа заполненных электронных уровней.

Обсудим теперь вопрос о том, когда в КТ появляется единственное связанное состояние. В работах [7,8] по теории уровней в квантовых точках форма точки аппроксимировалась сферой. Считалось, что наименьшее состояние носителей в КТ описывается волновой функцией с одним узлом в центре ямы. При параболическом законе

дисперсии такой уровень в яме не может поместиться, если параметры КТ выбрать близкими к экспериментально наблюдаемому [9]. Поэтому было необходимо использовать непараболический закон дисперсии, что было сделано в [8]. В рамках непараболического приближения уже возможно существование связанного состояния с одним узлом в центре сферической КТ. Число уровней в кластере возрастает при замене параболического приближения на непараболическое, поскольку это соответствует, грубо говоря, существенному увеличению эффективной массы. Поэтому в настоящей работе дается лишь оценка снизу для числа уровней в кластере. С учетом непараболическости зоны проводимости число уровней субструктуры в кластере с заданными толщиной и диаметром несомненно станет больше.

На рис. 4 изображена гистограмма зависимостей числа дырочных уровней в эллипсоиде от квадрата диаметра, аналогичная рис. 3 для электронов. Горизонтальная прямая внизу рисунка проведена на уровне  $N = 8$ . Видно, что число дырочных уровней огромно по сравнению с числом электронных уровней при том же диаметре. Таким образом, данный кластер практически никогда не бывает квантовой точкой для дырок. Эти гистограммы, как отмечалось выше, оказываются прямыми линиями.

Авторы выражают благодарность А.В. Субашиеву за конструктивную критику.

## Список литературы

- [1] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП, **32** (4), 385 (1998).
- [2] Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике* (М., Наука, 1974).
- [3] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш. *Специальные функции* (М., Наука, 1977).
- [4] В.М. Левин, Ю.И. Гросберг. *Дифференциальные уравнения математической физики* (М.; Л., Гостехиздат, 1951).
- [5] В.И. Смирнов. *Курс высшей математики* (М., ГИТТЛ, 1954) т. II, с. 340.
- [6] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган (М., Наука, 1979).
- [7] L.V. Asryan, R.A. Suris. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 554 (1996).
- [8] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев. *Письма ЖТФ*, **27** (6), 65 (2001).
- [9] В.П. Евтихийев, О.В. Константинов, Е.Ю. Котельников, А.В. Матвеевцев, А.Н. Титков, А.С. Школьник. *Письма ЖТФ*, **27** (16), 40 (2001).

Редактор Л.В. Беляков

## The substructure of carrier levels in an ellipsoid-shaped strongly flattened quantum dot

G.G. Zegrya, O.V. Konstantinov, A.V. Matveentsev

loffe Physicotechnical Institute  
of the Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia