

## ВПЛИВ СИМЕТРІЇ ФОРМИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ЕЛЕКТРОНА

В. І. Бойчук, І. В. Білінський, І. О. Шаклеїна

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна*

(Отримано 22 жовтня 2007 р.; в остаточному вигляді — 5 травня 2008 р.)

У роботі за допомогою теорії груп досліджено вплив форми квантової точки (КТ) на розщеплення енергетичних рівнів електрона. Зокрема детально проаналізовано розщеплення енергетичних рівнів для КТ кубічної, гексагональної та тетрадральної форми. За основу взято квантову точку сферичної симетрії, для якої енергію заряду знаходимо точно — як розв'язок рівняння Шредингера. За допомогою варіаційного методу (для основного стану) та теорії збурень знайдено енергії та хвильові функції станів. Конкретні обчислення проведено для гетероструктур GaAs/AlAs та InAs/GaSb. Одержані результати необхідно врахувати при побудові послідовної теорії електронних станів у КТ кубічної, гексагональної та тетрадральної форм.

**Ключові слова:** квантова точка, теорія груп, теорія збурень, розщеплення енергетичних рівнів, наногетероструктура, варіаційний метод.

PACS number(s): 78.20.Np

### I. ВСТУП

Останніми роками досягнуто значних успіхів у вивченні гетеросистем із квантовими точками та квантовими дротами (КД) різної форми [1–6].

Для отримання фізичних результатів, які претендують на пояснення експериментальних даних, розглянуто певні моделі реальних гетероструктур. У межах цих моделей необхідно зробити деякі припущення стосовно форми квантових точок, їх розподілу за розмірами, взаємодії з матрицею та між собою.

Вплив геометрії форми на електронну структуру нанокристалів викликає значну зацікавленість, бо від енергетичного спектра залежать оптичні та електричні властивості гетеросистем. Надзвичайно важливими як з наукового, так і з прикладного погляду є багаточастотні структури з КД та КТ. У цьому випадку форма КТ та КД також відіграє суттєву роль як фактор впливу на енергетичні властивості квазічастинок. Незважаючи на величезні можливості комп'ютерних обчислень, при теоретичних розрахунках завжди є потреба вибору такої моделі, яка б не дуже спрощувала реальну фізичну ситуацію, однак дозволяла аналітичний опис отриманих результатів, тобто можливість докладно проаналізувати вплив різних параметрів моделі на кінцеві залежності фізичних величин. Для різних гетероструктур розглянуто КТ сферичної [4–7], кубічної [11], циліндричної [6,10], еліпсоїдальної [12–14] та гексагональної форм.

Останнім часом у зв'язку з широким використанням методики Странського–Крастанова для отриман-

ня гетеросистем із напівпровідниковою матрицею вважають, що форма КТ має вигляд піраміди [15,16]. Зважаючи на погану “гладкість” поверхні такої КТ, для знаходження енергії та густин імовірностей заряджених частинок необхідні складні числові обчислення. Однак найновіші експериментальні дані свідчать, що навіть така форма КТ потребує уточнення. Тому є роботи, де КТ вважають зрізаними пірамідами [17,18] чи зрізаними кулями [19]. Зрозуміло, що вибір форми КТ ґрунтується на фізичному аналізі технології отримання гетероструктури й на тих міркуваннях, щоб максимально наблизити результати експериментальних вимірювань та теоретичних даних.

Мета нашої роботи полягає в тому, щоб, використовуючи теорію груп, дослідити вплив форми КТ на розщеплення енергетичних станів і визначити величину розщеплення за допомогою варіаційного методу (для основного стану) та теорії збурень. За основу взято квантову точку сферичної симетрії, для якої енергію заряду електрона знаходимо точно — як розв'язок рівняння Шредингера.

### II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ. КТ КУБІЧНОЇ ФОРМИ

Уважаємо, що спин частинки дорівнює нулеві. Розглянемо спершу квантову яму кубічної форми:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & x < -a/2, \quad x > a/2, \quad |y| > a/2, \quad |z| > a/2 \\ -U_0, & |x| < a/2, \quad |y| < a/2, \quad |z| < a/2. \end{cases} \quad (2)$$

Гамільтоніан можна записати, увівши сферичний потенціал такої ж висоти й такого ж “об’єму” ( $a^3 = \frac{4}{3}\pi R^3$ ):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_{sf}(\mathbf{r}) + (U(\mathbf{r}) - U_{sf}(\mathbf{r})) \\ &\equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_{sf}(\mathbf{r}) + W(\mathbf{r}) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + W(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3)$$

де  $W(\mathbf{r})$  — поправка. Якщо стани частинки описуються гамільтоніаном  $H_0(\mathbf{r})$ :

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) \Psi^0(\mathbf{r}) = E^0 \Psi^0(\mathbf{r}), \quad (4)$$

то розв’язок цієї задачі відомий. Хвильові функції станів мають вигляд:

$$\Psi^0(\mathbf{r}) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (5)$$

де  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  — сферична функція, а радіальна хвильова функція записується по-різному — залежно від області:  $r < a$ ,  $r \geq a$ . Для зв’язаних станів, коли  $E^0 < 0$ , маємо:

$$R_l(r) = A j_l(kr), \quad r \leq R,$$

$$R_l(r) = B h_l^{(1)}(xr), \quad r > R, \quad (6)$$

де  $k = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2}(E^0 + U_0)}$ ,  $x = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2}E^0}$ ,  $E^0 < 0$ ,  $j_l$ ,  $h_l^{(1)}$  — функції Бесселя та Ганкеля. Енергію квантових станів знаходимо з умов зшивання хвильової функції:

$$A j_l(kR) = B h_l^{(1)}(xR)$$

$$\frac{1}{m_1} A j_l'(kR) = \frac{1}{m_2} B h_l^{(1)'}(xR). \quad (7)$$

Функції  $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$  можна вибрати як базис представлення групи сферичної симетрії:

$$D(\varphi) = e^{i(A_x \varphi_x + A_y \varphi_y + A_z \varphi_z)} = e^{i(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\varphi})}, \quad (8)$$

де  $A_x, A_y, A_z$  — матриці безмежно малого повороту, для яких виконуються правила комутації:

$$[A_x, A_z] = i A_y, \quad [A_y, A_z] = i A_x. \quad (9)$$

Якщо замість матриць  $A_x, A_y, A_z$  ввести такі матриці:

$$A_z = A_z, \quad A_{\pm} = A_x \pm i A_y,$$

то справедливі співвідношення:

$$A_z^l Y_{lm} = m Y_{lm}$$

$$A_+^l Y_{lm} = \sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l, m+1}, \quad (10)$$

$$A_-^l Y_{lm} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l, m-1}.$$

У вибраному базисі матричні елементи матриць

$$\begin{aligned} (A_3^l)_{m', m} &= m \delta_{m, m'}; \quad (A_+^l)_{m', m} \\ &= \sqrt{(1+m+1)(1-m)} \delta_{m+1, m'}, \end{aligned} \quad (11)$$

$$(A_-^l)_{m', m} = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \delta_{m-1, m'}.$$

Матриці безмежно малих поворотів повністю визначають, згідно з (8), матрицю представлення для довільних кутів поворотів  $\varphi$ . Оскільки характери незвідних представлених елементів одного класу однакові, досить розглянути повороти навколо однієї з осей: осі  $z$ . При повороті на кут  $\varphi$  навколо осі  $z$  хвильові функції  $Y_{lm}$  домножуються, як відомо, на  $e^{im\varphi}$ , а матриця представлення має вигляд:

$$D_l(\varphi) = \begin{pmatrix} e^{il\varphi} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(l-1)\varphi} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-il\varphi} \end{pmatrix}. \quad (12)$$

Із (1) легко одержати характер  $\chi_l(\varphi)$  представлення  $D_l$ :

$$\begin{aligned} \chi_l(\varphi) &= \sum_m D_{l, mm}(\varphi) = \sum_{m=-l}^l e^{im\varphi} \\ &= \frac{\sin(l + \frac{1}{2})\varphi}{\sin \frac{\varphi}{2}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Для малих кутів повороту  $\varphi$  характер  $\chi_l = 2l + 1$  і дорівнює розмірності представлення  $D_l$ .

Повернімося тепер до аналізу рівняння Шредингера для гамільтоніана з кубічною симетрією (3). Відомо, що цей гамільтоніан комутує з такими операціями симетрії системи:

- 1) тотожне перетворення  $e$ ;
- 2) три повороти на кут  $\pi$  — кожний навколо однієї з трьох осей 4-го порядку, що становлять клас  $C_4^2$ ;
- 3) по два повороти на  $\frac{\pi}{2}$  і  $-\frac{\pi}{2}$  навколо осі 4-го порядку становлять шість елементів класу  $C_4$ ;
- 4) шість поворотів на  $\pi$  — кожний навколо однієї з шести осей 2-го порядку — клас  $U_2$ ;
- 5) по два повороти на  $\frac{2}{3}\pi$  і  $-\frac{2}{3}\pi$  навколо кожної з чотирьох осей 3-го порядку становлять вісім елементів класу  $C_3$ .

Стільки ж елементів симетрії ще одержуємо за умови врахування наявності центра симетрії (інверсії). Однак наявність чи відсутність центра симетрії в групі симетрії “зовнішнього” поля для розгляданого питання не має значення, бо поведінка хвильової функції при інверсії (парність або непарність рівня) не стосується до моменту  $l$ .

У таблиці 1 наведено характери кубічної групи симетрії  $O$ :

| Назви представлення | $e$ | $8C_3$ | $3C_2$ | $6U_2$ | $6C_4$ |
|---------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| $A_1$               | 1   | 1      | 1      | 1      | 1      |
| $A_2$               | 1   | 1      | 1      | -1     | -1     |
| $E$                 | 2   | -1     | 2      | 0      | 0      |
| $F_1$               | 3   | 0      | -1     | -1     | 1      |
| $F_2$               | 3   | 0      | -1     | 1      | -1     |

Таблиця 1.

Якщо порівняти характери представлень групи сферичної та кубічної симетрії, видно, що стани з  $l = 0$  не розщеплюються. Врахування кубічної симетрії квантової точки змінить лише величину енергії кожного стану з  $l = 0, 1$ . Для станів з  $l > 1$  одержуємо розщеплення рівнів, бо ці представлення стають звідними, якщо врахувати поправку кубічної симетрії ( $W$ ). Розкладаючи кожне з представлень  $\chi_l$  на незвідні частини, можна визначити шукане розщеплення.

Якщо позначити характер елементів класу  $\rho$  для представлення  $\mu$  як  $\chi_\rho^\mu$ , то число  $N_\mu$ , визначає, скільки разів представлення  $\mu$  міститься в цьому представленні з характеристиками  $\chi_\rho$ :

$$N_\mu = \frac{1}{h} \sum_{\rho=1}^{N_\rho} h_\rho \chi_\rho^{\mu*} \chi_\rho.$$

де  $h$  — кількість елементів групи,  $h_\rho$  — кількість елементів класу  $\rho$ .

Розгляньмо незвідні представлення групи сферичної симетрії з  $l = 2, 3$  і врахуймо, що група кубічної симетрії є підгрупою даної групи (таблиця 2).

| Назва представлення | $e$ | $8C_3$ | $3C_2$ | $6U_2$ | $6C_4$ |
|---------------------|-----|--------|--------|--------|--------|
| $D_0$               | 1   | 1      | 1      | 1      | 1      |
| $D_1$               | 3   | 0      | -1     | -1     | 1      |
| $D_2$               | 5   | -1     | 1      | 1      | -1     |
| $D_3$               | 7   | 1      | -1     | -1     | -1     |

Таблиця 2.

Очевидно, що  $D_0 = A_1$

Обчислімо числа  $N_\mu$  для  $p$ -станів:  $N_{A_1} = N_{A_2} = N_E = N_{F_2} = 0, N_{F_1} = 1$ . Отже,  $D_1 = F_1$ .

Для випадку  $l = 2$  ( $d$ -стани):  $N_{A_1} = N_{A_2} = N_{F_1} = 0, N_E = N_{F_2} = 1$ .

Отже,

$$D_2 = E + F_2.$$

Аналогічно можна довести, що

$$D_3 = A_2 + F_1 + F_2.$$

Отже, стан з  $l = 2$  у кубічній КТ розщеплюється на два: один двократно і один трикратно вироджений, а стани з  $l = 3$  розщеплюється на три: один двократно і два трикратно вироджені.

### III. КТ З ПОВЕРХНЕЮ У ФОРМІ ПРАВИЛЬНОЇ ШЕСТИГРАННОЇ ПРИЗМИ ТА ТЕТРАЕДРА

Розгляньмо тепер квантові точки, поверхня яких має форму правильної шестигранної призми. Нехай розміри цих КТ в різних напрямках відрізняються незначно. У цьому випадку гамільтоніан електрона знову можна вибрати у вигляді (3), де  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  характеризується сферичною симетрією.

Повний гамільтоніан системи характеризуватиметься симетрією  $D_6$ , яка задається шістьма незвідними представленнями: чотири одновимірні ( $A_1, A_2, A_3, A_4$ ) та два двовимірні ( $E_1, E_2$ ).

Аналіз розщеплення  $p, d$ -станів для КТ розглядової форми показав, що

$$D_1 = A_1 + E_2, D_2 = A_1 + E_1 + E_2, \\ D_3 = A_2 + A_3 + A_4 + E_1 + E_2.$$

Урахування гексагональної симетрії квантової точки приведе до того, що  $p$ -стани розщепляться на два стани: один невироджений і один двократно вироджений. Стани з  $l = 2$  також розщепляться, але на три стани: два двократно вироджені та один невироджений. А  $f$ -стани розщепляться на п'ять станів: три невироджені та два двократно вироджені.

Відомо, що гетеросистеми з квантовими точками можна одержати за допомогою різних технологій. Зокрема, у методиці Странського–Крастанова вважається, що КТ мають форму піраміди чи зрізаної піраміди [15–18]. Розгляньмо, як перетворюються стани групи сферичної симетрії при переході до групи обертань тетраедра, яка задається трьома одновимірними ( $A_1, E_1, E_2$ ) та одним тривимірним ( $F$ ) представленнями. Обчислення показують, що

$$D_1 = F, D_2 = E_1 + F, D_3 = A + 2F.$$

Отже, “включення” збурення тетрагональної симетрії не розщеплює вироджених  $p$ -станів,  $d$ -стани розщепляться на два невироджені стани та один трикратно вироджений, а  $f$ -стани розщепляться на один невироджений та два трикратно вироджені стани.

### IV. ЕНЕРГІЯ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ У КТ КУБІЧНОЇ ФОРМИ

Обчислімо енергію електронних станів у КТ кубічної форми. Гамільтоніан задачі має вигляд (3). Для знаходження енергії та хвильових функцій станів використовуємо варіаційний метод (для основного стану) та теорію збурень.

У варіаційній задачі пробну хвильову функцію основного стану електрона шукаємо у вигляді:

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) \Psi_2(y) \Psi_3(z), \quad (14)$$

$$\text{де } \Psi(\xi) = \begin{cases} c_1^i \sin \alpha \xi + c_2^i \cos \alpha \xi, & |\xi| \leq a/2 \\ c_3^i \exp(\beta \xi), & \xi < -a/2 \\ c_4^i \exp(-\beta \xi), & \xi > a/2, \end{cases}$$

$\alpha$  і  $\beta$  — варіаційні параметри, причому  $\beta > 0$ ,  $\xi$  — одна з декартових координат.

Записуючи умови неперервності хвильової функції та потоку ймовірності на межах поділу середовищ, отримуємо систему однорідних рівнянь. Ця система має нетривіальні розв'язки, якщо виконуються такі співвідношення між варіаційними параметрами  $\alpha$  і  $\beta$ :

$$\begin{aligned} \beta_1 &= -\frac{m_2}{m_1} \alpha \operatorname{ctg} \left( \frac{a \alpha}{2} \right), \\ \beta_2 &= \frac{m_2}{m_1} \alpha \operatorname{tg} \left( \frac{a \alpha}{2} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

де  $m_1, m_2$  — ефективні маси електрона та матриці відповідно. Коефіцієнти  $c_i$  визначаються з умови нормування функцій  $\Psi$ .

Згідно з методом Рітца енергію системи знаходили з умови мінімуму функціонала:

$$J = \iiint \Psi(x, y, z) \hat{H} \Psi(x, y, z) dx dy dz.$$

При цьому необхідно враховувати те, що з умови  $\beta > 0$  одержуємо:

$$\beta = \begin{cases} \frac{m_2}{m_1} \alpha \operatorname{tg} \left( \frac{a \alpha}{2} \right), & \frac{\pi}{a} n \leq \alpha \leq \frac{\pi}{a} (n+1), \quad n = 0, 1, 2 \dots \\ -\frac{m_2}{m_1} \alpha \operatorname{ctg} \left( \frac{a \alpha}{2} \right), & \text{інші } \alpha. \end{cases}$$

Конкретні обчислення проведено для гетеросистем GaAs/AlAs та InAs/GaSb.

Енергію основного стану електрона як функцію розміру КТ обчислено також за допомогою теорії збурень. На рис. 1 подано залежність першої поправки до енергії, що зумовлена збуренням  $W$ , стану:  $n_r = 0, l = 0$ . Для порівняння подано також залежність різниці між енергією основного стану кубічної КТ, що одержана варіаційним методом, та енергією основного стану сферичної КТ такого самого об'єму (сумарна поправка до енергії).

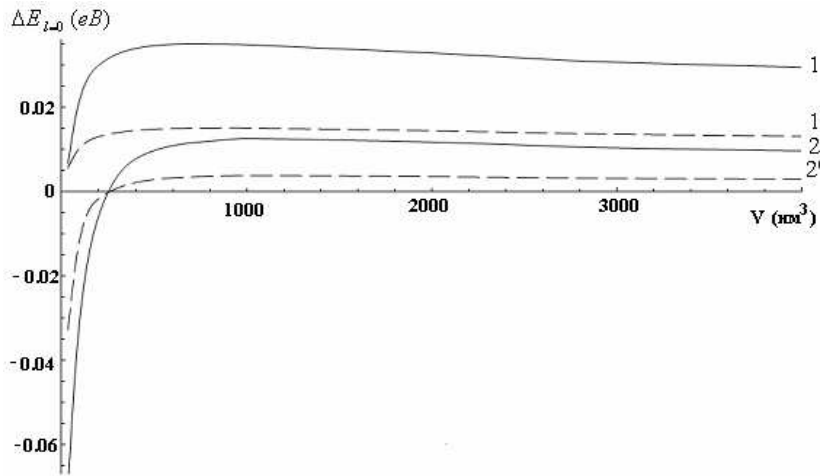


Рис. 1. Залежність різниці між енергією основного стану електрона в кубічній та сферичній КТ від об'єму КТ, яка обчислена за теорією збурень (криві 1, 1') та варіаційним методом (криві 2, 2') для гетеросистем InAs/GaSb (суцільні криві) та GaAs/AlAs (штрихові криві).

Видно, що для обох типів гетероструктур різниця між енергією електрона основного стану КТ кубічної форми і КТ сферичної форми змінюється немонотонно зі зміною розмірів КТ. Як і слід було очікувати, варіаційний метод дає менше значення енергії електрона кубічної КТ, ніж теорія збурень. Для великих  $R$  різниця між результатами обох обчислень є меншою, ніж при малих  $R$ . Пояснення отриманих залежностей якісно легше зрозуміти на основі теорії збурень.

Формування величини поправки відбувається на основі двох конкуруючих факторів. Як показує аналіз збурення, функція  $W = W(x, y, z)$  є складною функцією координат, яка приймає, як додатні так і від'ємні значення в ділянці межі поділу середовищ, і при обчисленні потрібних інтегралів необхідно послідовно враховувати складні межі інтегрування, що зумовлені перетином поверхонь куба та кулі. Зменшення об'єму КТ веде до ефективного зростання “потужності” по-

тенціалу  $W$ . З іншого боку, зменшення об'єму супроводжується зростанням енергії заряду і зменшенням густини ймовірності перебування частинки в актуальній ділянці простору.

Важливу роль відіграє маса електрона. Для гетероструктури InAs/GaSb маса частинки всередині КТ менша, ніж у структурі GaAs/AlAs. Це є причиною того, що різниця між результатами теорії збурень та варіаційного методу для першої гетероструктури більша, ніж для другої.

Використовуючи теорію збурень та симетрійний аналіз, обчислили також поправки до енергії електрона в  $p$ - та  $d$ -станах. Ці стани є виродженими. Для знаходження першої поправки до енергії  $\Delta E_l$  необхідно знайти матричні елементи від  $(W - \Delta E'_l)$  на відповідних хвильових функціях гамільтоніана  $\hat{H}_0$  і ви-

значник матриці прирівняти до нуля. Задача про знаходження  $\Delta E'_l$  суттєво спрощується, якщо матриця є діагональною. Врахування симетрії задачі дозволило найліпше виконати поставлене завдання. Поряд з цим запропонований підхід дає змогу визначити точність проведених обчислень завдяки тому, що теорія груп дає чіткі рекомендації щодо рівності матричних елементів між собою або рівності їх нулеві.

Згідно з теорією груп [21], сферичні функції перетворюються як партнери в базисах незвідних представлень групи куба  $O$ . Зокрема, функції  $Y_{1,-1}, Y_{1,0}, -Y_{1,1}$  утворюють базис представлення  $F_1$ ; представленню відповідає базис:  $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,2} + Y_{2,-2}), Y_{2,0}$ , а функції  $\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{2,2} - Y_{2,-2}), Y_{2,1}, Y_{2,-1}$  є базисом представлення  $F_2$ .

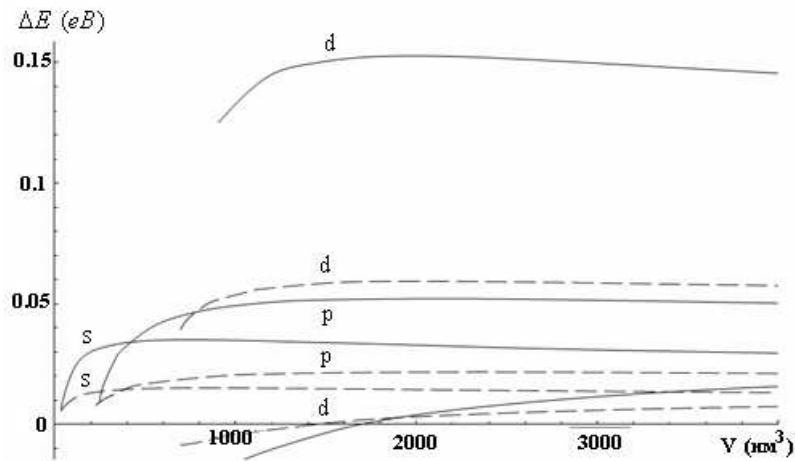


Рис. 2. Залежність  $\Delta E_l = \Delta E_l(V)$  для гетеросистем GaAs/AlAs (штрихові криві) та InAs/GaSb (суцільні криві)

Обчислення матричних елементів, проведене для гетероструктур GaAs/AlAs та InAs/GaSb, показало, що відповідно до теорії груп відмінними від нуля на цих функціях є лише діагональні матричні елементи. Причому, як і слід очікувати, для стану  $F_1$  всі діагональні елементи однакові (стан у кубічній КТ залишається трикратно виродженим). Обчислення матричних елементів проведено з точністю до  $10^{-12}$ .

Для  $l = 2$  матриця  $5 \times 5$  також є діагональною і містить два елементи однієї величини ( $E$ -стан) та три елементи іншої величини ( $F_2$ -стан). Отже, ми одержуємо два значення поправки до енергії, різниця між якими визначатиме величину розщеплення  $d$ -стану в кубічній КТ.

Результати обчислень залежності  $\Delta E'_l$  від об'єму КТ для обох гетероструктур подано на рис. 2.

Із рис. 2 видно, що при великих розмірах КТ поправки до енергії як  $s$ -, так і  $p$ -станів є невеликими. Зменшення об'єму веде до зростання  $\Delta E_l$  ( $l = 0, 1$ ). Що стосується поправок  $\Delta E_3^{(1)}, \Delta E_3^{(2)}$ , то вони не ли-

ше суттєво відрізняються за величиною (при  $V=7000$   $\text{nm}^3$  для гетеросистеми InAs/GaSb  $\Delta E_3^{(2)} - \Delta E_3^{(1)} = 110$   $\text{meV}$ ), але й по-різному змінюються зі зміною об'єму. Зменшення  $V$  веде до збільшення розщеплення  $d$ -рівня, але коли  $V < V_0$  ( $V_0$  для цих гетероструктур різне), то розщеплення зменшується зі зменшенням  $V$ . Якщо провести порівняння між величинами розщеплення  $d$ -рівня для двох різних типів КТ, то видно, що в системі GaAs/AlAs розщеплення менше, ніж в InAs/GaSb. Цей ефект, як і величини поправок для  $s$ - і  $p$ -рівнів, також пояснюється різницею мас електрона в КТ відповідних наногетеросистем.

Отже, в цій статті за допомогою теорії груп досліджено вплив симетрії форми КТ на розщеплення енергетичних рівнів. Показано, що в КТ кубічної форми енергетичні рівні з  $l = 2$  ( $d$ -рівні) розщеплюються на два: один двократно й один трикратно вироджені, а рівні з  $l = 3$  розщеплюються на три: один двократно і два трикратно вироджені. В КТ, поверхня яких має гексагональну форму,  $p$ -рівні розщеплюються на

два: один невідроджений і один двократно вироджений; рівні з  $l = 2$  також розщеплюються, але на три: два двократно вироджені та один невідроджений;  $f$ -рівні розщеплюються на п'ять: три невідроджені та два двократно вироджені. Для тетраедральних КТ  $d$ -рівні розщеплюються на два невідроджені та один трикратно вироджений, а  $f$ -рівні — на один невідроджений та два трикратно вироджені.

За допомогою варіаційного методу (для основного стану) та теорії збурень знайдено енергії і хвильові

функції станів для КТ кубічної форми. Використовуючи теорію збурень та симетрійний аналіз, обчислено також поправки до енергії електрона у  $p$ - та  $d$ -станах. Конкретні обчислення проведено для гетероструктур GaAs/AlAs та InAs/GaSb.

Автори висловлюють щире подяку чл.-кор. НАН України проф. І. В. Стасюкові за добру організацію та творчу атмосферу виїзного семінару секції фізики Західного наукового центру НАН України (Дрогобицький педуніверситет, травень 2007 р.)

- 
- [1] E. R. Glaser, B. R. Bennett, B. V. Shanabrook, R. Magno, Appl. Phys. Lett. **68**, 3614 (1996).  
 [2] F. Hatami, W. T. Masselink, L. Schrottke, J. W. Tommand, V. Talalaev, C. Kristukat, A. R. Goñi, Phys. Rev. B **67**, 085306 (2003).  
 [3] H. Y. Liu, W. Zhou, D. Ding, W. H. Jiang, B. Xu, J. B. Liang, Z. G. Wang, Appl. Phys. Lett. **76**, 3741 (2000).  
 [4] Jian-Bai Xia, Phys. Rev. B. **40**, 8500 (1989).  
 [5] K. J. Vahala, P. C. Sercel, Phys. Rev. Lett. **65**, 239 (1990).  
 [6] P. C. Sercel, K. J. Vahala, Phys. Rev. B **42**, 3690 (1990).  
 [7] Г. Б. Григорян, Э. М. Казарян, А. Л. Эфрос, Т. В. Язева, Физ. тверд. тела **32**, 1772 (1990).  
 [8] І. В. Бойчук, Р. Ю. Кубай, Г. М. Годованець, І. С. Шевчук, Журн. фіз. досл. **10**, 220 (2006).  
 [9] І. В. Бойчук, І. В. Білинський, І. О. Шаклеїна, Оптоелектрон. напівпровід. техн. **8**, 232 (2005).  
 [10] P. C. Sercel, K. J. Vahala, Phys. Rev. B **44**, 5681 (1991).  
 [11] R. Romestain, G. Fishman, Phys. Rev. B **49**, 1774 (1994).  
 [12] G. Cantele, D. Ninno, G. Iadonisi, J. Phys.: Condens. Matter. **12**, 9019 (2000).  
 [13] G. Cantele, G. Piacente, D. Ninno, G. Iadonisi, Phys. Rev. B **66**, 113308 (2002).  
 [14] Al. L. Efros, Phys. Rev. B **46**, 7448 (1992).  
 [15] O. Stier, M. Grundmann, D. Bimberg, Phys. Rev. B **59**, 5688 (1999).  
 [16] R. Guo, H. Shi, X. Sun, W. Pecharapa, W. Techidheera, J. Nukeyaw, Science Asia **30**, 157 (2004).  
 [17] W. Sheng, J. Leburton, Phys. Rev. B **64**, 153302 (2001).  
 [18] W. Sheng, J. Leburton, Phys. Rev. Lett. **88**, 167401 (2002).  
 [19] S. Lee, O. Lazarenkova, F. Oyafuso, P. von Allmen, G. Klimeck, arXiv: cond-mat/0405019 (2004).  
 [20] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике* (Наука, Москва, 1973).  
 [21] Р. Нокс, А. Голд, *Симетрия в твердом теле* (Наука, Москва, 1973).

## INFLUENCE OF THE SYMMETRY OF A QUANTUM DOT SHAPE ON ITS ENERGY SPECTRUM

V. I. Boichuk, I. V. Bilynsky, I. O. Shakleina  
 Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University,  
 24, Ivan Franko St., Drohobych, UA-82100, Ukraine  
 e-mail: ioshak@mail.ru

In the paper the influence of a quantum dot shape on energy state splitting by group symmetry is studied. In particular, energy levels splitting of cubic, hexagonal, tetrahedral quantum dots is analyzed in detail. A quantum dot of spherical symmetry which serves as a basis yields an exact value of the charge (electron, hole) energy as well as a Schrödinger equation solution. In the frames of the variational method (in case of the ground state) and perturbation theory the energies and wave functions of states are found. Specific calculations are performed for the GaAs/AlAs and InAs/GaSb heterostructures. It is necessary to take account of derived results in developing a consecutive theory of electron states in cubic, hexagonal and tetrahedral quantum dots.