

УДК 539.37, 537.222.22

Розподіл електростатичного потенціалу та напруженості електричного поля в квантовій точці в межах нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака

Пелещак Р. М., Бачинський І. Я.

peleshchak@rambler.ru

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра загальної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100

Побудовано алгоритм розв'язку рівняння Пуассона-Фермі-Дірака для квантових точок сферичної та циліндричної геометрій у вигляді логарифма від степеневого ряду, який описує, з врахуванням деформаційного потенціалу, розподіл електростатичного потенціалу та напруженості електричного поля в квантовій точці, яка оточена матрицею.

1. Вступ

Однією із основних проблем у фізиці наносистем з квантовими точками є знаходження розподілу потенціалу, концентрації електронів та напруженості електричного поля як в квантовій точці, так і в матриці. У наш час добре відомі розв'язки лінеаризованого рівняння Пуассона – потенціали Дебая-Хюккеля, Дерягіна-Ландау-Вервея-Овербека [1,2] та потенціал розрахований в межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі [3]. Однак, в наногетеросистемах з неоднорідним розподілом концентрації носіїв заряду необхідно враховувати нелінійну залежність електронної густини від електростатичного потенціалу, тому необхідно знати розв'язок нелінійного рівняння Пуассона з функцією Фермі-Дірака. У роботах [4-7] чисельним методом знайдено розв'язок рівняння Пуассона-Больцмана. Аналітичний розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Больцмана для плоскої, сферичної та аксіальної геометрій був знайдений в роботах [8,9].

У даній роботі знайдено просторовий розподіл електростатичного потенціалу, напруженості електричного поля та концентрації електронів у квантовій точці на основі нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака з граничними умовами, які враховують вплив напруженої межі квантова точка-матриця.

2. Математична модель

Розглядаємо нелінійне рівняння Пуассона-Фермі-Дірака для напруженої наногетеросистеми з квантовими точками сферичної та циліндричної симетрії:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{L}{r} \frac{d\varphi}{dr} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} (n(\varphi(r)) - n_0), \quad (1)$$

з наступними граничними умовами на межі квантова точка-матриця:

$$\begin{cases} \varphi(r)|_{r=R_0} = \varphi_0 \\ -\frac{d\varphi(r)}{dr}|_{r=R_0} = E_0 \end{cases} \quad (2)$$

де $L = 1, 2$ – відповідно для циліндричної та сферичної симетрій; ε – відносна діелектрична проникність матеріалу квантової точки; ε_0 – діелектри-

чна стала; n_0 – середня концентрація електронів у наногетеросистемі з квантовими точками; φ_0 – значення електростатичного потенціалу на межі квантова точка-матриця; E_0 – значення напруженості електричного поля на межі квантова точка-матриця; $n(\varphi(r))$ – координатний розподіл носіїв заряду у квантовій точці, який знаходиться у відповідності до статистики Фермі-Дірака [3] :

$$n(\varphi(r)) = \frac{2N_{QD}}{\exp\left(\frac{E_1 + \lambda_0 + a_c \varepsilon_{rr} - e\varphi(r) - \mu}{kT}\right) + 1} \quad (3)$$

де N_{QD} – поверхнева густина квантових точок, яка рівна для наногетероструктури InAs/GaAs з квантовими точками InAs $\approx 3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$ [10]; E_1 – енергія електрона на першому локалізованому рівні в квантовій ямі; a_c – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності матеріалу квантової точки; μ – хімічний потенціал матеріалу квантової точки, яка рівна $\varepsilon_{rr}(\mathbf{r})$ – радіальна компонента тензора деформації матеріалу квантової точки, яка рівна $\varepsilon_{rr} = C_1 < 0$. Для наногетеросистеми InAs/GaAs з квантовими точками InAs радіусом $R_0 = 100 \text{ \AA}$ – $C_1 = -0.011$ [11].

Підставивши вираз для концентрації носіїв заряду (3) у рівняння (1) отримаємо в явному вигляді нелінійне рівняння Пуассона-Фермі-Дірака з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{L}{r} \frac{d\varphi}{dr} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\frac{N_{QD}^{\frac{3}{2}}}{e^{\frac{E_1 + \lambda_0 + a_c \varepsilon_{rr} - e\varphi(r) - \mu}{kT}} + 1} - n_0 \right) \quad (4)$$

Введемо безрозмірний потенціал $\psi = -\frac{e\varphi(r)}{kT}$, а в якості одиниці довжини візьмемо електронний радіус Дебая $R_{ed} = \left(\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 n_0}\right)^{1/2}$. Тоді рівняння (4) запишеться у вигляді :

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{L}{z} \frac{d\psi}{dz} = 1 - \frac{\delta}{e^{\psi + \psi_0} + 1} \quad (5)$$

де $z = \frac{r}{R_{ed}}$, $\psi_0 = \frac{E_1 + \lambda_0 + a_c \varepsilon_{rr} - \mu}{kT}$, $\delta = \frac{(N_{QD})^{\frac{3}{2}}}{n_0} \leq 1$,

Розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (5) знаходимо у вигляді логарифма від степеневому ряду $y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$:

$$\psi = Z \ln(y) - \psi_0, \quad (6)$$

де Z - деяке ціле, відмінне від нуля число. Де розвинення y у степеневий ряд здійснюємо в околі точки $a = \frac{R_0}{R_{ed}}$ (межа квантової точки з матрицею), де задані граничні умови. Зробимо заміну змінної:

$$z = a(1-x)^p \quad (7)$$

де p - додатне ціле або напівціле число.

З врахуванням (6) та (7) рівняння (5) набуде вигляду:

$$(1-x) \left[y \frac{d^2 y}{dx^2} - \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \right] + (p-1-Lp) y \frac{dy}{dx} - \frac{p^2 a^2}{Z^2} (1-x)^{2p-1} y^2 \left(1 - \frac{\delta}{y^Z + 1} \right) = 0 \quad (8)$$

З граничними умовами:

$$y(0) = \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right), \quad \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0} = \tilde{E}_0 \frac{pa}{Z} \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right) \quad (9)$$

де $\tilde{\psi}_0 = -\frac{e\varphi_0}{kT}$; $\tilde{E}_0 = -E_0 \frac{eR_{ed}}{kT}$.

Розв'язок рівняння (8) будемо шукати у вигляді степеневому ряду:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \quad (10)$$

З граничних умов (9) випливає, що $b_0 = \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right)$, $b_1 = \tilde{E}_0 \frac{pa}{Z} \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right)$. Підставляючи (10) в (8), отримаємо систему алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів b_n , $n = 2, 3, \dots$:

$$(1-x) \left[\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \frac{d^2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)}{dx^2} - \left(\frac{d \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)}{dx} \right)^2 \right] + (p-1-Lp) \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \frac{d \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)}{dx} -$$

$$-\frac{p^2 a^2}{Z^2} (1-x)^{2p-1}$$

$$\times \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^2 \left(1 - \frac{\delta}{\left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^Z + 1} \right) = 0 \quad (11)$$

Від значення Z залежить ступінь нелінійності рівняння (8). У даній задачі параметр Z вибираємо таким, щоб ступінь нелінійності рівняння (8) була мінімальною, тобто $Z=1$.

Оскільки незалежна змінна $x = 1 - \left(\frac{z}{a}\right)^{\frac{1}{p}}$, то при збільшенні параметра p зростає швидкість збіжності ряду (10). Але більші значення p ускладнюють рівняння (8). Тому коефіцієнти ряду (10) розраховувались при $Z = 1$, $p = 1/2$.

Тоді розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (4) з врахуванням (6), (7) і (10) представиться у вигляді:

$$\varphi(r) = -\frac{kT}{e} \left[Z \ln \left(b_0 + b_1 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{\frac{1}{p}} \right) + b_2 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{\frac{1}{p}} \right)^2 + \dots + b_n \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{\frac{1}{p}} \right)^n + \dots \right) - \psi_0 \right] \quad (12)$$

Швидкість збіжності ряду (12) зменшується при $r \rightarrow 0$, тобто в околі центра квантової точки. Щоб забезпечити точність розрахунку $\left| \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\varphi_{n+1}} \right| \leq 10^{-5}$ необхідно обчислити $\sim 10^3$ членів ряду (12).

Радіус збіжності ряду (12) знаходиться в межах:

$$\left(1 - \frac{b_n}{b_{n+1}} \right)^p < \frac{r}{R_0} < \left(1 + \frac{b_n}{b_{n+1}} \right)^p \quad (13)$$

3. Числові розрахунки і обговорення результатів

У даному параграфі, в рамках нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (4) з врахуванням електрон - деформаційного потенціалу, приводяться числові результати теоретичних досліджень координатної залежності розподілу електростатичного потенціалу, напруженості електричного поля та електронної густини в квантовій точці InAs, яка знаходиться в матриці GaAs (наявність матриці відображено в граничних умовах (2)) з такими параметрами: $a_c = -5.08 eV$ [12]; $\varepsilon = 15.15$; $E_1 = 0.1 eV$ [13]; $\mu = 0.2 eV$; $\varphi_0 = \varphi(r)|_{r=100 \text{ \AA}} = 0,095 eV$ [3]; $E_0 = -\frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=100 \text{ \AA}} = -50 \frac{kB}{cm} [3]$.

Числовий розрахунок електростатичного потенціалу $\varphi(r)$, напруженості електричного поля $E(r)$ та електронної густини $n(r)$ в квантовій точці InAs проведений для 80 членів ряду (12), з відносною похибкою $\sim 3 \cdot 10^{-3}$.

На рис.1-3 наведено координатні залежності електростатичного потенціалу $\varphi(r)$, напруженості електричного поля $E(r)$ та перерозподілу електронної густини $n(r)$ в квантовій точці при наступних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9.

Як видно (рис.1) із збільшенням параметра δ (температури) потенціал $\varphi(r)$ зростає (спадає). Зокрема, збільшення параметра δ в інтервалі 0.1 – 0.9 приводить до збільшення електростатичного потенціалу в центрі квантової точки радіуса $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при температурі $T = 77 \text{ K}$ на 7 мВ, а при $T = 300 \text{ K}$ на 20 мВ.

Розподіл напруженості електричного поля у квантовій точці (рис. 2) має немонотонний характер з мінімумом, положення якого з ростом температури зсувається до центру квантової точки. Із збільшенням параметра δ в інтервалі 0.1 – 0.9 спостерігається зменшення напруженості електричного поля на 40 кВ/см при $T = 300 \text{ K}$.

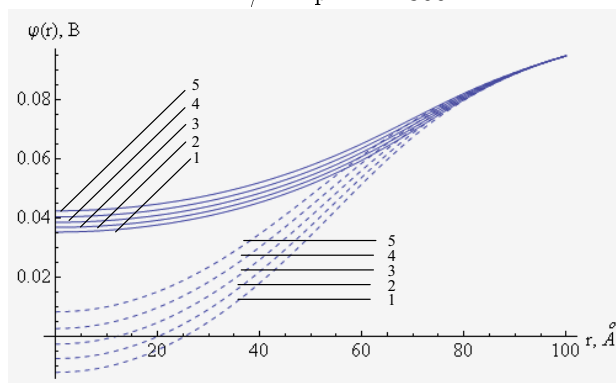


Рис.1. Координатна залежність електростатичного потенціалу $\varphi(r)$ в квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9; суцільна лінія – $T = 77 \text{ K}$, пунктирна лінія – $T = 300 \text{ K}$.

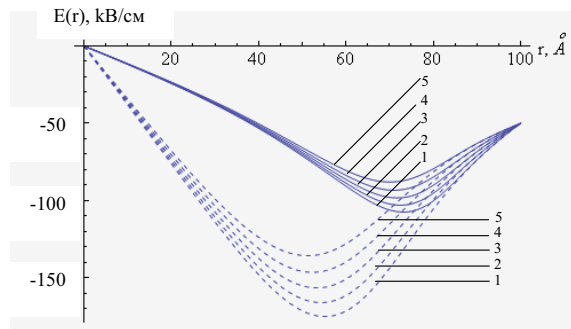


Рис.2. Координатна залежність напруженості електричного поля $E(r)$ в квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9; суцільна лінія – $T = 77 \text{ K}$, пунктирна лінія – $T = 300 \text{ K}$.

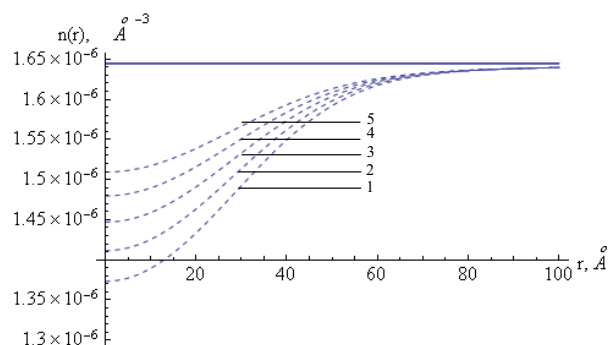


Рис.3. Координатна залежність заповнення електронних станів у квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9; суцільна лінія – $T = 77 \text{ K}$, пунктирна лінія – $T = 300 \text{ K}$.

Як видно з графіків, представлених на рис. 3, із віддаленням від центру квантової точки концентрація електронів монотонно зростає. Причому, із зменшенням температури концентрація електронів у квантовій точці зростає, а характер розподілу практично стає рівномірний (рис.3 – суцільна лінія).

Бібліографія

- [1] Ландау Л.Д. *Собрание трудов*. Т. 1. — М.: Наука, 1969. — 386-411 с.
- [2] Verwey E.J.W., Overbeek J.Th.G. *Theory of the Stability of Lyophobic Colloids*. — Amsterdam: Elsevier, 1948.
- [3] Peleshchak R.M., Bachynsky I.Ya. Electric properties of the interface quantum dot-matrix // *Condensed Matter Physics*. — 2009. — 12, № 2. — P. 215–223.
- [4] Gibson E.G. Ionization Phenomen in a Gas -Particle Plasma // *Phys. Fluids*. — 1996. — 9, № 12. — P. 2389–2399.
- [5] Нефедов А.П., Петров О.Ф., Храпак С.А. Потенциал электростатического взаимодействия в термической плазме с макрочастицами // *Физика плазмы*. — 1998. — 24, № 12. — P. 1109–1113.
- [6] Яковленко С.И. Дебаевский атом в плазме // *Краткие сообщения по физике ФИАН*. — 2002. — № 1. — С. 9–18.
- [7] Гундиенков В.А., Яковленко С.И. Взаимодействие заряженных пылинок в облаках термодинамически равновесных зарядов // *ЖЭТФ*. — 2002. — 122, № 5. — С. 1003–1018.
- [8] Яковленко С.И. Сила взаимодействия заряженных плоскостей в облаке электронов и в плазме // *Письма в ЖТФ*. — 2001. — 27, № 9. — С. 83–94.

- [9] Дьячков Л.Г. Аналитическое решение уравнения Пуассона-Больцмана для сферической и аксиальной симметрии // Письма в ЖТФ. — 2005. — **31**, № 5. — С. 58–66.
- [10] Brounkov P.N., Polimeni A., Stoddart S.T., and and other. Electronic structure of self-assembled *InAs* quantum dots in *GaAs* matrix // Appl. Phys. Lett. — 1998. — **73**, № 8. — С. 1092(3 pages).
- [11] Пелещак Р.М., Бачинський І.Я. Формування $n^+ - n$ переходів на напруженій межі квантова точка-матриця // УФЖ. — 2009. — **54**, № 6. — С. 627–633.
- [12] Chris G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory // Phys. Rev. B. — 1989. — **39**, № 3. — Р. 1871–1883.
- [13] Новиков Б.В., Зегря Г.Г., Пелещак Р.М., та ін. Барические свойства квантовых точек *InAs* // ФТП. — 2008. — **42**, № 9. — С. 1094–1101.