

Р. М.Пелешак, І. Я.Бачинський, М. В. Дорошенко, Ю. М.Галь

НЕЛІНІЙНА МОДЕЛЬ РОЗПОДІЛУ ПОТЕНЦІАЛУ В НАНОГЕТЕРОСИСТЕМІ З КВАНТОВОЮ ТОЧКОЮ ДЛЯ РІВНЯННЯ ПУАССОНА–ФЕРМІ–ДІРАКА

Побудовано алгоритм розв'язку рівняння Пуассона–Фермі–Дірака для квантових точок (КТ) сферичної та циліндричної геометрій, який описує, з урахуванням деформаційного потенціалу, розподіл електростатичного потенціалу та напруженості електричного поля в квантовій точці, що оточена матрицею.

Вступ. Однією із основних проблем у моделюванні електрон-деформаційних ефектів фізики наносистем з квантовими точками є знаходження розподілу потенціалу [7], концентрації електронів та напруженості електричного поля як у квантовій точці, так і в матриці. Сьогодні добре відомі розв'язки лінеаризованого рівняння Пуассона. Це потенціали Дебая–Хюккеля, Дерягіна–Ландау–Вервея–Овербека [10, 13] та потенціал, розрахований у межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі [12]. Однак в наногетеросистемах з неоднорідним розподілом концентрації носіїв заряду необхідно враховувати нелінійну залежність електронної густини від електростатичного потенціалу, тому слід знати розв'язок нелінійного рівняння Пуассона з функцією Фермі–Дірака. Чисельно [11, 6, 1] розв'язано рівняння Пуассона–Больцмана. Аналітичний розв'язок нелінійного рівняння Пуассона–Больцмана для плоскої, сферичної та аксіальної геометрій знайдено в працях [2, 5].

Нижче знайдено розв'язок нелінійного диференціального рівняння Пуассона–Фермі–Дірака з крайовими умовами, які враховують вплив напруженої межі квантова точка–матриця.

Математична модель. Розглядаємо нелінійне рівняння Пуассона–Фермі–Дірака для напруженої наногетеросистеми з квантовими точками сферичної та циліндричної симетрій

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} + \frac{L}{r} \frac{d\varphi}{dr} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left(\frac{2N_{QD}}{\exp\left(\frac{E_n + \lambda_0 + a_c\varepsilon_1 - e\varphi(r) - \mu}{kT}\right) + 1} - n_0 \right) \quad (1)$$

з такими крайовими 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; k – стала Больцмана; T – абсолютна температура; ε – відносна діелектрична проникність матеріалу квантової точки; ε_0 – діелектрична 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; $N_{QD} \approx 3 \times 10^{10}$ [8] – поверхнева густина квантових точок; E_n – власні значення оператора Шредінгера [12]:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{L}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L_1}{r^2} \right) + V_{def}^{(i)}(r) - e\varphi_i(r), \quad (3)$$

де $L_1=l(l+1)$ – для сферичної і $L_1=m^2-1/4$ – для циліндричної симетрії; $l=0,1,2,\dots$; $n=1,2,\dots$; $m=-l,-l+1,-l+2,\dots,0,1,2,\dots,l$,

$$V_{def}^{(i)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} -(|\Delta E_c| - |a_c^{(1)}\epsilon_1| - |a_c^{(2)}\epsilon_2|), \\ 0. \end{cases} \quad (4)$$

де $i=1$ відповідає InAs, $i=2$ – GaAs, ΔE_c – глибина потенціальної ями для електронів в КТ InAs в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs; a_c – константа гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності матеріалу квантової точки; μ – хімічний потенціал матеріалу квантової точки; λ_0 – енергія дна недеформованої зони провідності у квантовій точці; $\epsilon_i = Sp \epsilon_i^{\mathbf{u}}$ ($i=1,2$) – параметр деформації i -го матеріалу наногетероструктури, який визначають через зміщення атомів \mathbf{u}_i , що знаходять з рівняння рівноваги, яке для сферичної симетрії має вигляд

$$\frac{d^2 u_r^{(i)}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_r^{(i)}}{dr} - \frac{2}{r^2} u_r^{(i)} = D^{(i)} e \frac{d\phi^{(i)}(r)}{dr}, \quad (5)$$

де $D^{(i)} = \frac{(1+v_i)(1-2v_i)}{(a^{(i)})^3 E_i (1-v_i)}$; $a^{(i)}$ – параметр ґратки i -го матеріалу наногетероструктури; v_i, E_i – відповідно коефіцієнт Пуассона та модуль Юнга i -го матеріалу наногетероструктури; e – заряд електрона; $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів у i -му напівпровідниковому матеріалі. Загальний розв'язок неоднорідного рівняння (5) подаємо у вигляді суми механічного $u_{r\text{mech}}^{(i)}(r)$ та електрон-деформаційного $u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r)$ складників:

$$u_r^{(i)}(r) = u_{r\text{mech}}^{(i)}(r) + u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r), \quad (6)$$

де $u_{r\text{mech}}^{(i)}(r) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}$; $u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r) = -\frac{D^{(i)} e}{r^2} \int r^2 \phi^{(i)}(r) dr$.

Для незначних концентрацій електронів провідності в матриці наногетеросистеми ($n_0 < 10^{18} \text{ см}^{-3}$) значення електрон-деформаційного складника зміщення $u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r)$ у квантовій точці на порядок менший, ніж механічного $u_{r\text{mech}}^{(i)}(r)$, тому в першому наближенні складник $u_{r\text{el-def}}^{(i)}(r)$ нехтуємо.

Поле зміщень визначає такі компоненти тензора деформацій :

$$\epsilon_{rr}^{(1)} = \epsilon_{\phi\phi}^{(1)} = \epsilon_{\theta\theta}^{(1)} = C_1^{(1)}, \quad (7)$$

$$\epsilon_{rr}^{(2)} = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \quad (8)$$

$$\epsilon_{\phi\phi}^{(2)} = \epsilon_{\theta\theta}^{(2)} = C_1^{(2)} + \frac{C_2^{(2)}}{r^3}. \quad (9)$$

Коефіцієнти $C_1^{(1)}, C_1^{(2)}, C_2^{(2)}$ знаходимо із розв'язку системи рівнянь

$$\begin{cases} u_r^{(2)}|_{r=R_0} - u_r^{(1)}|_{r=R_0} = f R_0, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R_0} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_0} + P_L|_{r=R_0}, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}, \end{cases} \quad P_L = \frac{2\alpha}{R_0 - |u_r^{(1)}|}, \quad (10)$$

$\alpha = 0.657$ Дж/м² – поверхнева енергія квантової точки (InAs); f – параметр невідповідності ґраток контактувальних матеріалів: $f = \frac{d^{(1)} - d^{(2)}}{d^{(1)}} \approx 7\%$; $\sigma_{ef} = 10^9$ Н/м² – ефективне значення механічної напруги взаємодіючих квантових точок; $\sigma_{rr}^{(i)}$ – радіальні складники тензора механічної напруги i -го матеріалу [3].

Введемо безрозмірний потенціал $\psi = -\frac{e\varphi(r)}{kT}$, а за одиницю довжини візьмемо електронний радіус Дебая $R_{ed} = \left(\frac{\epsilon\epsilon_0 kT}{e^2 n_0}\right)^{1/2}$. Тоді рівняння (1) набуває вигляду

$$\frac{d^2 \Psi}{dz^2} + \frac{L}{z} \frac{d\Psi}{dz} = 1 - \frac{\delta}{e^{\Psi + \Psi_0} + 1}, \quad (11)$$

де $z = \frac{r}{R_{ed}}$; $\Psi_0 = \frac{E_n + \lambda_0 + a_c \epsilon_1 - \mu}{kT}$; $\delta = \frac{(N_{QD})^{3/2}}{n_0} \leq 1$.

Розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (11) шукаємо у вигляді логарифма від степеневого ряду

$$\Psi = Z \ln(y) - \Psi_0, \quad (12)$$

де Z – деяке ціле, відмінне від нуля, число

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \quad (13)$$

Твердження. Розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (1) з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії з крайовими умовами (2) можна подати у вигляді

$$\varphi(r) = -\frac{kT}{e} \times \left[Z \ln \left(b_0 + b_1 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^p \right) + b_2 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^p \right)^2 + \dots + b_n \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^p \right)^n + \dots \right) - \Psi_0 \right]. \quad (14)$$

Доведення. Розвинення у степеневий ряд y здійснюємо в околі точки $a = \frac{R_0}{R_{ed}}$ (межа квантової точки з матрицею) за заданих крайових умов. Зробимо заміну змінної

$$z = a(1-x)^p, \quad (15)$$

де p – додатне ціле або напівціле число.

З урахуванням (12) та (15) рівняння (11) набуде вигляду

$$(1-x) \left[y \frac{d^2 y}{dx^2} - \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \right] + (p-1-Lp) y \frac{dy}{dx} - \frac{p^2 a^2}{Z} (1-x)^{2p-1} y^2 \left(1 - \frac{\delta}{y^Z + 1} \right) = 0 \quad (16)$$

з крайовими умовами

$$y(0) = \exp\left(\frac{\Psi_0 + \Psi_0}{Z}\right), \quad \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=0} = \frac{\Psi_0}{Z} \frac{pa}{Z} \exp\left(\frac{\Psi_0 + \Psi_0}{Z}\right), \quad (17)$$

де $\Psi_0 = -\frac{e\varphi_0}{kT}$; $\Psi_0 = -E_0 \frac{eR_{ed}}{kT}$.

Розв'язок рівняння (16) шукатимемо у вигляді степеневого ряду (13).

З крайових умов (17) випливає, що $b_0 = \exp\left(\frac{\Psi_0 + \psi_0}{Z}\right)$,
 $b_1 = \frac{p a}{Z} \exp\left(\frac{\Psi_0 + \psi_0}{Z}\right)$. Підставляючи (13) в (16), отримаємо систему алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів b_n , $n = 2, 3, \dots$:

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

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

$$- \frac{p^2 a^2}{Z} (1-x)^{2p-1} \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^2 \left(1 - \frac{\delta}{\left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^Z + 1} \right) = 0. \quad (18)$$

Від значення Z залежить степінь нелінійності рівняння (16). Тут параметр Z вибираємо таким, щоб степінь нелінійності рівняння (16) був мінімальним, тобто $Z=1$.

Отже, розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (1) з урахуванням (12), (13) і (15) набуде вигляду (14). Твердження доведено.

Оскільки незалежною змінною є $x = 1 - (z/a)^{\frac{1}{p}}$, то зі збільшенням параметра p зростає швидкість збіжності ряду (14). Але більші значення p ускладнюють рівняння (16).

Зауважимо, що швидкість збіжності ряду (14) зменшується при $r \rightarrow 0$, тобто в околі центра квантової точки. Щоб забезпечити точність розрахунку $\left| \frac{\Phi_{n+1} - \Phi_n}{\Phi_{n+1}} \right| \leq 10^{-5}$, необхідно обчислити $\sim 10^3$ членів ряду (14).

Радіус збіжності ряду (14) знаходиться в межах

$$\left(1 - \frac{b_n}{b_{n+1}} \right)^p < \frac{r}{R_0} < \left(1 + \frac{b_n}{b_{n+1}} \right)^p. \quad (19)$$

Маючи вираз для електростатичного потенціалу $\phi(r)$ (14), знаходимо заповнення електронних станів $n(r)$ у квантовій точці:

$$n(\phi(r)) = \frac{2N_{QD}}{\exp\left(\frac{E_n + \lambda_0 + a_c \varepsilon_1 - e\phi(r) - \mu}{kT}\right) + 1}. \quad (20)$$

Числові розрахунки і обговорення результатів. Використовуючи нелінійне рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (1) з урахуванням електрон-деформаційного потенціалу, наведемо 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 крайових умовах (2)) з такими параметрами: $a_c = -5.08$ eV [9]; $\varepsilon = 15.15$;

$E_n = 0.1eV$ [4]; $\mu = 0.2eV$; $\phi_0 = \phi(r) \Big|_{r=100\text{Å}} = 0,095V$; $E_0 = \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r=100\text{Å}} = -50 \frac{кВ}{см}$ [12].

Числові розрахунки виконано в середовищі Mathematica. Розрахунок електростатичного потенціалу $\phi(r)$, напруженості електричного поля $E(r)$ та електронної густини $n(r)$ у квантовій точці InAs здійснено для 80 членів ряду (14) з відносною похибкою $\sim 3 \cdot 10^{-3}$.

На рис. 1–3 подано координатні залежності електростатичного потенціалу $\phi(r)$, напруженості електричного поля $E(r)$ та перерозподілу електронної густини $n(r)$ відповідно в квантовій точці розміром $R_0 = 100\text{Å}$ за таких значень параметра δ : 1 – 0,1; 2 – 0,5; 3 – 0,9 та таких значень температури T : суцільна лінія – 77 К, штрихова – 300 К.

Як видно (рис. 1), зі збільшенням параметра δ (температури) потенціал $\phi(r)$ зростає (спадає). Зокрема, зі збільшенням параметра δ в інтервалі 0,1...0,9 підвищується електростатичний потенціал у центрі квантової точки радіуса $R_0 = 100\text{Å}$ при $T = 77\text{К}$ на 7мВ, а при $T = 300\text{К}$ на 20 мВ.

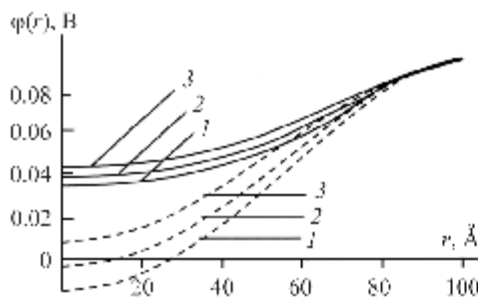


Рис. 1.

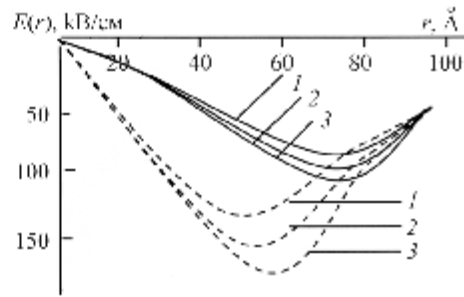


Рис. 2.

Розподіл напруженості електричного поля у квантовій точці (рис. 2) має немонотонний характер з мінімумом, положення якого з ростом температури зсувається до центра квантової точки. Зі збільшенням параметра δ в інтервалі 0,1...0,9 напруженість електричного поля зменшується на 40 кВ/см при $T = 300\text{К}$.

З віддаленням від центра квантової точки концентрація електронів монотонно зростає (рис. 3). Причому, із падінням температури вона у квантовій точці підвищується, а характер розподілу практично стає рівномірним (рис. 3, суцільна лінія).

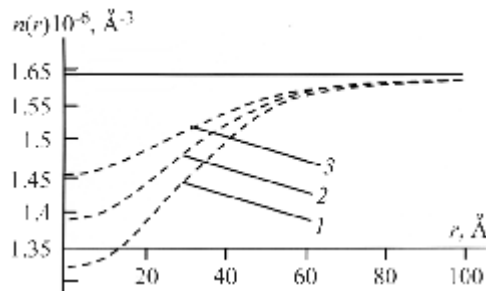


Рис. 3.

1. Гундиенков В. А., Яковленко С. И. Взаимодействие заряженных пылинок в облаках термодинамически равновесных зарядов // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. – 2002. – **122**, № 5. – С. 1003–1018.
2. Дьячков Л. Г. Аналитическое решение уравнения Пуассона–Больцмана для сферической и аксиальной симметрии // Письма в Журнал технической физики – 2005. – **31**, № 5. – С. 58–66.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. – М.: Наука, – 1965. – 202 с.
4. Новиков Б. В., Зегря Г. Г., Пелещак Р. М., и др. Барические свойства квантовых точек // Физика и техника полупроводников – 2008. – **42**, № 9. – С. 1094–1101.
5. Яковленко С. И. Сила взаимодействия заряженных плоскостей в облаке электронов и в плазме // Письма в Журнал технической физики – 2001. – **27**, № 9. – С. 83–94.
6. Яковленко С. И. Дебаевский атом в плазме // Краткие сообщения по физике ФИАН (Физический институт имени П.Н.Лебедева Российской академии наук). – 2002. – № 1. – С. 9–18.
7. Anzai C., Kiyoy Y., Sumino Y. Violation of Casimir for static QCD Potential at Three-Loop Order // Nucl. Phys. B. – 2010. – **834**. – P. 28–46.
8. Brounkov P. N., Polimeni A., Stoddart S. T., et al // Electronic structure of InAs quantum dots in GaAs matrix // Appl. Phys. Lett. – 1998. – **73**. – P. 1092.
9. Chris G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory // Phys. Rev. B. – 1989. – **39**. – P.1871.
10. Derjaguin B. V., Landau L. D. Theory of the stability of strongly charged lyophobic sols and of the adhesion of strongly charged particles in solutions of electrolytes // Acta Physicochim. USSR. – 1941. – **14**, № 6. – P. 633–662.
11. Gibson E. G. Ionization phenomena in a gas-particle plasma // Phys. Fluids. – 1966. – **9**, № 12. – P. 2389–2399.
12. Peleshchak R. M., Bachynsky I. Ya. Electric Properties of the interface quantum dot – matrix // Condensed Matter Physics. – 2009. – **12**, № 2. – P. 215–223.
13. Verwey E.J.W., Overbeek J. Th. G. Theory of the Stability of Lyophobic Colloids. – Amsterdam: Elsevier, – 1948. – 340 p.

НЕЛЕНЕЙНАЯ МОДЕЛЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПОТЕНЦИАЛА В НАНОГЕТЕРОСИСТЕМЕ С КВАНТОВОЙ ТОЧКОЙ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА–ФЕРМИ–ДИРАКА

Построен алгоритм решения уравнения Пуассона–Ферми–Дирака для сферической и цилиндрической геометрий в виде логарифма от степенного ряда, который описывает, с учетом деформационного потенциала, распределение электростатического потенциала и напряженности электрического поля в квантовой точке, которая окружена матрицей.

NONLINEAR MODEL OF THE POTENTIAL DISTRIBUTION IN THE NANOHETEROSYSTEM WITH A QUANTUM DOT FOR POISSON–FERMI–DIRAC EQUATION

The algorithm of the solution of the Poisson–Fermi–Dirac equation for a case of spherical and cylindrical geometries is constructed in the form of the logarithm from a power series which describe, taking into account a deformation potential, allocation of an electrostatic potential and an electric field strength in a quantum dot which is surrounded by a matrix.

Дрогобицький держ. педагогічний ун-т
імені Івана Франка, м. Дрогобич

Отримано
11.07.11

Р. М. Пелещак, І. Я. Бачинський, М. В. Дорошенко, Ю. М. Галь

R. M. Peleshchak, I. Y. Bachynski, M. V. Doroshenko, Y. M. Gal