

**АНАЛІТИЧНИЙ РОЗВ'ЯЗОК
РІВНЯННЯ ПУАССОНА-ФЕРМІ-ДІРАКА
ДЛЯ НАПРУЖЕНОЇ НАНОГЕТЕРОСИСТЕМИ
З КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ
СФЕРИЧНОЇ ТА АКсіАЛЬНОЇ СИМЕТРІЙ**

Роман ПЕЛЕЩАК, Ігор БАЧИНСЬКИЙ

Дрогобицький державний педагогічний університет
імені Івана Франка
вул. Івана Франка 24, Дрогобич 82100
e-mail: slajider@rambler.ru

Редакція отримала статтю 10 липня 2010 р.

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, обчислений в межах самоузгодженої електрон-деформаційної моделі [3]. Однак в нано-гетеросистемах з неоднорідним розподілом концентрації носіїв заряду слід 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 цій 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 такими 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 $L = 1, 2$ – для циліндричної та сферичної симетрій відповідно; 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; $n(\varphi(r))$ – координатний розподіл носіїв заряду у квантовій точці, який шукаємо відповідно 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 наногетеро-структури 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 – стала гідростатичного деформаційного потенціалу зони провідності матеріалу квантової точки; μ – хімічний потенціал матеріалу квантової точки; λ_0 – енергія дна недеформованої зони провідності у квантовій точці; $\varepsilon_{rr}(\vec{r})$ – 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), отримуємо в явному вигляді нелінійне рівняння Пуассона-Фермі-Дірака з врахуванням електрон-деформаційної взаємодії:

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

Введемо безрозмірний потенціал $\psi = -\frac{e\varphi(r)}{kT}$, а за одиницю довжини візьмемо електронний радіус Дебая $R_{ed} = \left(\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 n_0}\right)^{1/2}$. Тоді рів-

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

Розв'язок нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (5) знаходимо у вигляді логарифма:

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

де Z – деяке ціле, відмінне від нуля число. Розвинення y у степеневий ряд здійснюємо в околі точки $a = R_0/R_{ed}$ (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 урахуванням (6) та (7) рівняння (5) набуде вигляду:

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

Вибираємо граничні умови:

$$y(0) = \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right),$$

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

які відповідають умовам (2) (тут $\tilde{\psi}_0 = -\frac{e\varphi_0}{kT}$; $\tilde{E}_0 = -E_0 \frac{eR_{ed}}{kT}$).

Розв'язок рівняння (8) будемо шукати у вигляді степеневого 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), отримуємо систему алгебраїчних рівнянь для визначення коефіцієнтів b_n , $n = 2, 3, \dots$:

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

$$\begin{aligned}
 & (p-1-Lp) \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \frac{d \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)}{dx} - \frac{p^2 a^2}{Z^2} (1-x)^{2p-1} \times \\
 & \times \left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^2 \left(1 - \frac{\delta}{\left(\sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n \right)^Z + 1} \right) = 0. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Від значення Z залежить ступінь нелінійності рівняння (8). У цій задачі параметр Z вибираємо таким, щоб ступінь нелінійності рівняння (8) був мінімальним, тобто $Z=1$.

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

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

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

Швидкість збіжності ряду (12) зменшується при $r \rightarrow 0$, тобто в околі центра квантової точки. Щоб забезпечити точність обчислення $\left| \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\varphi_{n+1}} \right| \leq 10^{-5}$ 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 ОБЧИСЛЕННЯ І ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

У цьому параграфі, в рамках нелінійного рівняння Пуассона-Фермі-Дірака (4) з врахуванням електрон-деформаційного потенціалу, наведені числові результати теоретичних досліджень координатної залежності розподілу електростатичного потенціалу, напруженості електричного поля та електронної густини в квантовій точці InAs, яка є

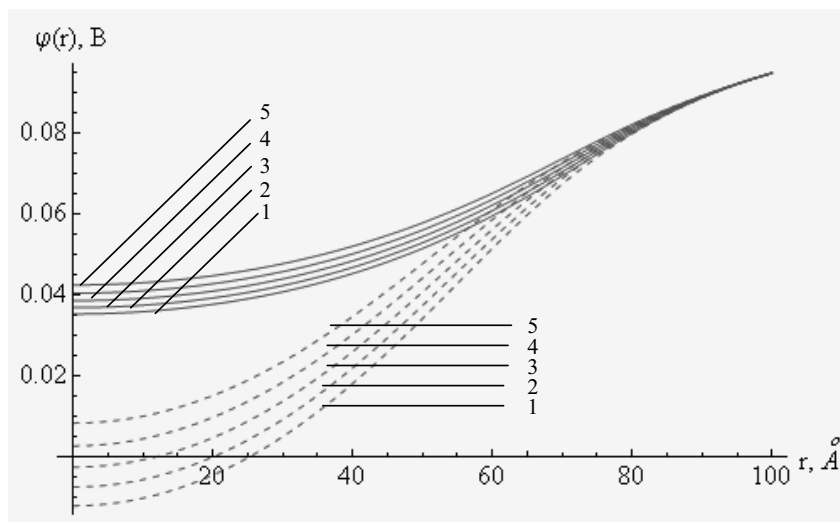


Рис. 1. Координатна залежність електростатичного потенціалу $\varphi(r)$ в квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1– $\delta = 0.1$, 2– 0.3 , 3– 0.5 , 4– 0.7 , 5– 0.9 ; суцільна лінія – $T = 77\text{K}$, пунктирна лінія – $T = 300\text{K}$.

матриці GaAs (наявність матриці відображено в граничних умовах (2)) з такими параметрами: $a_c = -5.08eB$ [12]; $\epsilon = 15.15$; $E_1 = 0.1eB$ [13]; $\mu = 0.2eB$; $\varphi_0 = \varphi(r)|_{r=100\text{\AA}} = 0,095B$ [3]; $E_0 = -\frac{d\varphi}{dr}|_{r=100\text{\AA}} = -50\frac{kB}{cM}$ [3].

Числове обчислення електростатичного потенціалу $\varphi(r)$, напруженості електричного поля $E(r)$ та електронної густини $n(r)$ в квантовій точці InAs проведено 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 для таких значень параметра δ : 1– $\delta = 0.1$, 2– 0.3 , 3– 0.5 , 4– 0.7 , 5– 0.9 .

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

Розподіл напруженості електричного поля у квантовій точці (рис. 2) має немонотонний характер з мінімумом, розташування 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 40кВ/см при $T = 300K$.

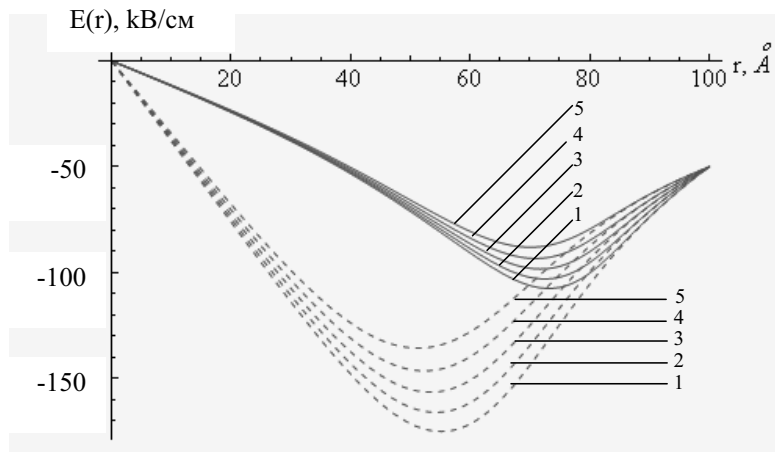


Рис. 2. Розподіл напруженості електричного поля $E(r)$ в квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9; суцільна лінія – $T = 77K$, пунктирна лінія – $T = 300K$.

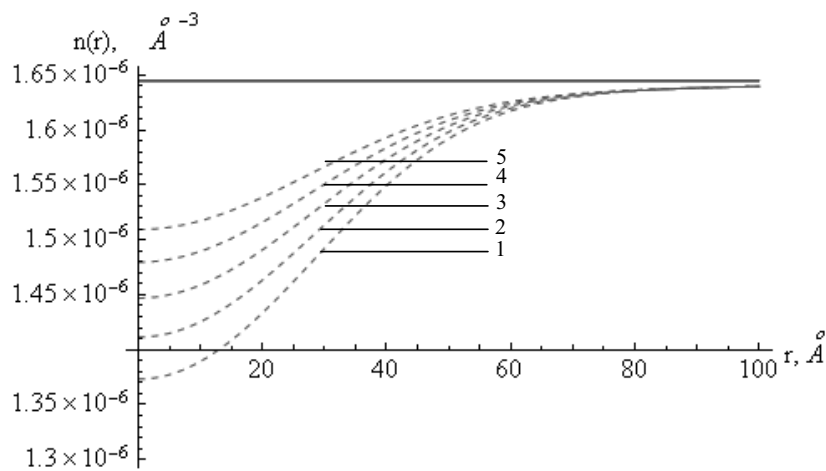


Рис. 3. Розподіл електронної концентрації у квантовій точці розміром $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при різних значеннях параметра δ : 1 – $\delta = 0.1$, 2 – 0.3, 3 – 0.5, 4 – 0.7, 5 – 0.9; суцільна лінія – $T = 77K$, пунктирна лінія – $T = 300K$.

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

ЛІТЕРАТУРА

- [1] *Derjaguin B.V., Landau L.D.* Acta Physicochim. USSR. 1941. **14**. 6.
- [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.* Cond. Matt. Phys. 2009. **12**. 2.
- [4] *Gibson E.G.* Phys. Fluids. 1996. **9**. 12.
- [5] *Нефедов А.П., Петров О.Ф., Храпак С.А.* Физика плазмы. 1998. **24**. 12.
- [6] *Яковленко С.И.* Краткие сообщения по физике ФИАН. 2002. 1.
- [7] *Гундиенков В.А., Яковленко С.И.* ЖЭТФ. 2002. **122**. 5.
- [8] *Яковленко С.И.* Письма в ЖТФ. 2001. **27**. 9.
- [9] *Дьячков Л.Г.* Письма в ЖТФ. 2005. **31**. 5.
- [10] *Brounkov P.N., Polimeni A., Stoddart S.T., Henini M., Eaves L., Main P.C.* Appl. Phys. Lett. 1998. **73**. 1092.
- [11] *Gibson E.G.* Phys. Fluids. 1996. **9**. 12.
- [12] *Пелешак Р.М., Бачинський І.Я.* УФЖ. 2009. **54**. 6.
- [13] *Новиков Б.В., Зегря Г.Г., Пелешак Р.М., Данькив О.О., Гайсин В.А., Талалаев В.Г., Штром И.В., Цырлин Г.Э.* ФТП. 2008. **42**. 9.

ANALYTICAL SOLUTION OF THE POISSON-FERMI-DIRAC EQUATION FOR STRAINED NANOHETEROSYSTEM WITH QUANTUM DOTS OF SPHERICAL AND AXIAL SYMMETRIES

Roman PELESHCHAK, Ihor BACHYNSKY

Ivan Franco Drohobych State Pedagogical University,
24 Ivan Franco Str., Drohobych, Lviv Region 82100
e-mail:slajider@rambler.ru

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 a logarithm from a power series which, taking into account a deformation potential, describe the allocation of an electrostatic potential and an electric field strength in a quantum dot surrounded by a matrix.