

01;06

Расчет потенциала и электронной плотности для напряженной полупроводниковой квантовой точки

© Р.М. Пелещак, И.Я. Бачинский, Г.Г. Зегря

Дрогобычский государственный педагогический университет им. Франко,
Дрогобыч

E-mail: slajider@rambler.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

E-mail: zegrya@theory.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 21 июня 2010 г.

В рамках нелинейной модели Пуассона для напряженной полупроводниковой квантовой точки рассчитано распределение электростатического потенциала, напряженности электростатического поля и электронной плотности с учетом деформационного потенциала, возникающего вследствие несогласованности параметров решетки квантовой точки и матрицы.

Последнее десятилетие характеризуется бурным развитием наноэлектроники, которое в значительной мере связано с использованием при создании нанооптоэлектронных приборов наноструктур с квантовыми точками. Особое место занимают наноструктуры с квантовыми точками, которые имеют малые размеры (~ 10 nm) и малую дисперсию формы и размеров. Электрические и оптические свойства таких наногетероструктур определяются главным образом энергетическим спектром носителей заряда, откуда следует, что одной из основных задач физики наноструктур с квантовыми точками является нахождение распределения потенциала, концентрации электронов и напряженности электрического поля в квантовой точке и в матрице. В наногетеро-

структурах с неоднородным распределением концентрации носителей заряда необходимо учитывать нелинейную зависимость электронной плотности от электростатического потенциала [1–3], поэтому в этом случае необходимо было знать решение нелинейного уравнения Пуассона с функцией Ферми–Дирака. В работах [4–7] решение уравнения Пуассона найдено численным методом. В работах [8,9] было определено аналитическое решение нелинейного уравнения Пуассона–Больцмана для плоской, сферической и аксиальной геометрии.

Целью данной работы является исследование пространственного распределения электростатического потенциала, напряженности электрического поля и концентрации электронов для квантовой точки на основе нелинейного уравнения Пуассона с граничными условиями, которые учитывают присутствие напряжений на границе между квантовой точкой и матрицей.

Рассмотрим нелинейное уравнение Пуассона для напряженной наногетероструктуры с квантовыми точками сферической и цилиндрической симметрии

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

и со следующими граничными условиями на границе квантовая точка–матрица:

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

Здесь $L = 1, 2$ для цилиндрической и сферической симметрии соответственно, ε — относительная диэлектрическая проницаемость в квантовой точке, ε_0 — диэлектрическая постоянная, n_0 — средняя концентрация электронов в наногетеросистеме с квантовыми точками, φ_0 — значение электростатического потенциала на границе между квантовой точкой и матрицей, E_0 — значение напряженности электрического поля на этой границе, $n(\varphi(r))$ — координатное распределение носителей заряда, которое определяется в соответствии со статистикой Ферми–Дирака [3]; тогда имеем

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

где N_{QD} — поверхностная плотность квантовых точек, которая для наногетероструктуры InAs/GaAs с квантовыми точками InAs пример-

но равна $\approx 3 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ [10]; E_1 — энергия электрона на первом локализованном уровне в квантовой точке InAs; a_c — константа гидростатического деформационного потенциала зоны проводимости; μ — химический потенциал; λ_0 — энергия дна недеформированной зоны проводимости в квантовой точке; $\varepsilon_{rr}(\vec{r})$ — радиальная компонента тензора деформации $\varepsilon_{rr} = C_1 < 0$.

Для наногетеросистемы InAs/GaAs с квантовыми точками InAs радиуса $R_0 = 100 \text{ \AA}$ имеем $C_1 = -0.011$ [11].

Введем безразмерный потенциал $\psi = -\frac{e\phi(r)}{kT}$, а в качестве единицы длины возьмем электронный радиус Дебая $R_{ed} = \left(\frac{\varepsilon\varepsilon_0 kT}{e^2 n_0}\right)^{1/2}$. Тогда уравнение (1) запишется в виде

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{L}{z} \frac{d\psi}{dz} = 1 - \frac{\delta}{e^{\psi+\psi_0} + 1}, \quad (4)$$

где

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

Решение нелинейного уравнения Пуассона (4) находим в виде логарифма

$$\psi = Z \ln(y) - \psi_0 \quad (5)$$

от степенного ряда $y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n$. Здесь Z — некоторое отличное от нуля целое число. Разложение y в степенной ряд мы будем проводить в окрестности точки $a = R_0/R_{ed}$ (граница квантовой точки с матрицей), для которой заданы граничные условия. Произведем замену переменной

$$z = a(1-x)^p, \quad (6)$$

где p — положительное целое или полуцелое число.

После учета (5) и (6) уравнение (4) принимает следующий вид:

$$(1-x) \left[y \frac{d^2 y}{dx^2} - \left(\frac{dy}{dx} \right)^2 \right] + (p-1-Lp)y \frac{dy}{dx} - \frac{p^2 a^2}{Z^2} (1-x)^{2p-1} y^2 \left(1 - \frac{\delta}{y^z + 1} \right) = 0, \quad (7)$$

а граничные условия —

$$y(0) = \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right), \quad \left.\frac{dy}{dx}\right|_{x=0} = \tilde{E}_0 \frac{pa}{Z} \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right), \quad (8)$$

где

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

Решение уравнения (7) будем искать в виде степенного ряда

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} b_n x^n. \quad (9)$$

Из граничных условий (8) следует, что

$$b_0 = \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right) \quad \text{и} \quad b_1 = \tilde{E}_0 \frac{pa}{Z} \exp\left(\frac{\tilde{\psi}_0 + \psi_0}{Z}\right).$$

Подставляя (9) в (7), получаем систему алгебраических уравнений для определения коэффициентов b_n , $n = 2, 3, \dots$. Степень нелинейности уравнения (7) зависит от величины Z . В данной задаче параметр Z выбираем таким, чтобы степень нелинейности уравнения (7) была минимальной, т.е. мы выбираем Z равным единице ($Z = 1$). Поскольку независимая переменная — это $x = 1 - (z/a)^{1/p}$, то при увеличении параметра p возрастает скорость сходимости ряда (9), правда, при больших значениях p уравнение (7) приобретает более сложный вид.

Аналитический вид решения нелинейного уравнения Пуассона (1) с учетом (5), (6) и (9) будет таким:

$$\begin{aligned} \varphi(r) = & -\frac{kT}{e} \left(Z \ln \left(b_0 + b_1 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{1/p} \right) + b_2 \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{1/p} \right)^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \dots + b_n \left(1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^{1/p} \right)^n + \dots \right) - \psi_0 \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Скорость сходимости ряда (11) уменьшается при $r \rightarrow 0$, т.е. в окрестности центра квантовой точки. Чтобы обеспечить точность рас-

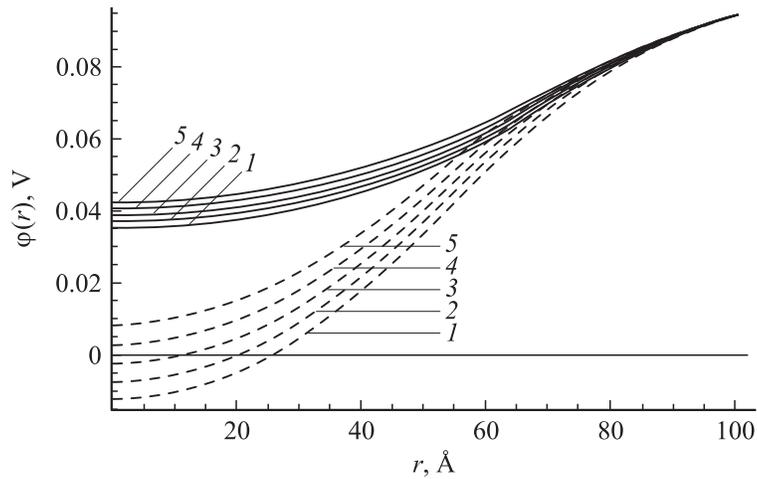


Рис. 1. Координатная зависимость электростатического потенциала $\varphi(r)$ в квантовой точке размером $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при разных значениях параметра δ : 1 — $\delta = 0.1$, 2 — 0.3, 3 — 0.5, 4 — 0.7, 5 — 0.9. Сплошная линия — $T = 77 \text{ K}$ и пунктирная линия — $T = 300 \text{ K}$.

чета величины $\left| \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\varphi_{n+1}} \right| \leq 10^{-5}$, необходимо вычислить $\sim 10^3$ членов ряда (10). Радиус сходимости ряда (10) находится в пределах

$$\left(1 - \frac{b_n}{b_{n+1}}\right)^p < \frac{r}{R_0} < \left(1 + \frac{b_n}{b_{n+1}}\right)^p. \quad (11)$$

Далее в рамках нелинейного уравнения Пуассона–Ферми–Дирака (1) с учетом электрон-деформационного потенциала проведены численные расчеты координатной зависимости распределения электростатического потенциала, напряженности электрического поля и электронной плотности для квантовой точки InAs, которая находится в матрице GaAs (наличие матрицы определяется заданием граничных условий (2)) с параметрами: $a_c = -5.08 \text{ eV}$ [12], $\varepsilon = 15.15$, $E_1 = 0.1 \text{ e}$ [13], $\mu = 0.2 \text{ Oe}$,

$$\varphi_0 = \varphi(r) \Big|_{r=100 \text{ \AA}} = 0.095 \text{ V} [3], \quad E_0 = \frac{d\varphi}{dr} \Big|_{r=100 \text{ \AA}} = -50 \frac{\text{kV}}{\text{cm}} [3].$$

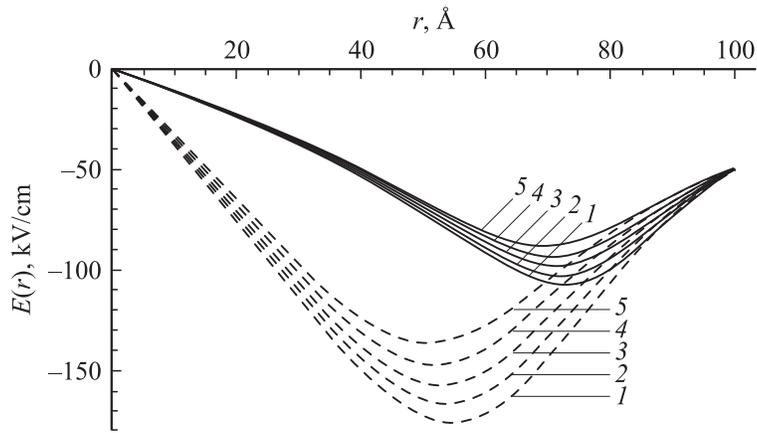


Рис. 2. Координатная зависимость напряженности электрического поля $E(r)$ в квантовой точке размером $R_0 = 100\text{Å}$ при разных значениях параметра δ : 1 — $\delta = 0.1$, 2 — 0.3, 3 — 0.5, 4 — 0.7, 5 — 0.9. Сплошная линия — $T = 77\text{ K}$, пунктирная линия — $T = 300\text{ K}$.

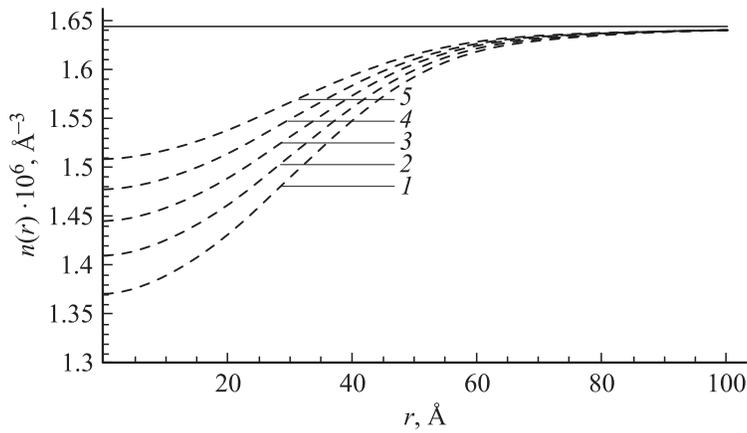


Рис. 3. Координатная зависимость электронной плотности $n(r)$ в квантовой точке размером $R_0 = 100\text{Å}$ при разных значениях параметра δ : 1 — $\delta = 0.1$, 2 — 0.3, 3 — 0.5, 4 — 0.7, 5 — 0.9. Сплошная линия — $T = 77\text{ K}$, пунктирная линия — $T = 300\text{ K}$.

Численный расчет электростатического потенциала $\varphi(r)$, напряженности электрического поля $E(r)$ и электронной плотности $n(r)$ в квантовой точке InAs проведен для восьмидесяти членов ряда (11) с относительной погрешностью $\sim 3 \cdot 10^{-3}$.

На рис. 1–3 приведены координатные зависимости электростатического потенциала $\varphi(r)$, напряженности электрического поля $E(r)$ и перераспределения электронной плотности $n(r)$, рассчитанные для квантовой точки при следующих значениях параметра δ : 1 — $\delta = 0.1$; 2 — 0.3; 3 — 0.5; 4 — 0.7; 5 — 0.9.

Как видно из рис. 1, с увеличением параметра δ (температуры) потенциал $\varphi(r)$ возрастает (спадает). В частности, увеличение параметра δ в интервале 0.1–0.9 приводит к увеличению электростатического потенциала в центре квантовой точки с радиусом $R_0 = 100 \text{ \AA}$ при температуре $T = 77 \text{ K}$ на 7 mV, а при температуре $T = 300 \text{ K}$ — на 20 mV.

Распределение напряженности электрического поля в квантовой точке (рис. 2) имеет немонотонный характер с минимумом: положение которого с ростом температуры сдвигается к центру квантовой точки. С увеличением параметра δ в интервале 0.1–0.9 наблюдается уменьшение напряженности электрического поля на 40 kV/cm при $T = 300 \text{ K}$.

Как видно из графиков, представленных на рис. 3, с удалением от центра квантовой точки концентрация электронов монотонно возрастает, причем с уменьшением температуры концентрация электронов в квантовой точке растет, а характер распределения практически становится равномерным (рис. 3 — сплошная линия).

Список литературы

- [1] *Derjaguin B.V., Landau L.D.* // Acta Physicochim. USSR. 1941. V. 14. N 6. P. 633–662.
- [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.* // Condensed Matter Physics. 2009. V. 12. N 2. P. 215–223.
- [4] *Gibson E.G.* // Phys. Fluids. 1966. V. 9. N 12. P. 2389–2399.
- [5] *Нефедов А.П., Петров О.Ф., Храпак С.А.* // Физика плазмы. 1998. Т. 24. № 12. С. 1109–1113.

- [6] Яковленко С.И. // Краткие сообщения по физике. ФИАН. 2002. № 1. С. 9–18.
- [7] Гундиенков В.А., Яковленко С.И. // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. № 5. С. 1003–1018.
- [8] Яковленко С.И. // Письма в ЖТФ. 2001. Т. 27. В. 9. С. 83–94.
- [9] Дьячков Л.Г. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. В. 5. С. 58–66.
- [10] Brounkov P.N., Polimeni A., Stoddart S.T., Henini M., Eaves L., Main P.C. // Appl. Phys. Lett. 1998. V. 73. P. 1092.
- [11] Пелещак Р.М., Бачинский И.Я. // УФЖ. 2009. Т. 54. № 6. С. 627–633.
- [12] Van de Walle C.G. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 1871.
- [13] Новиков Б.В., Зегря Г.Г., Пелещак Р.М., Даньков О.О., Гайсин В.А., Талалаев В.Г., Штром И.В., Цырлин Г.Э. // ФТП. 2008. Т. 42. В. 9. С. 1094–1101.