

В.І. Бойчук, І.В. Білінський, Р.Я. Лешко

Властивості багатоелектронних сферичних квантових точок

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
Інститут фізики, математики та інформатики, кафедра теоретичної фізики,
вул. Стрийська 3, м. Дрогобич, 82100, Львівська обл., E-Mail: leshkoroman@mail.ru*

Для сферичної наногетероструктури β -HgS/CdS у наближенні ефективної маси встановлено кількість зв'язаних станів, які можуть бути заповнені у квантовій точці. На основі цих результатів та варіаційного методу Томаса-Фермі обчислено розподіл концентрації електронів, а також одержано енергію, що припадає на один електрон. Маючи відомий розподіл густини заряду у наногетеросистемі, визначено потенціал системи електронів, а також обчислено енергію електрона, що знаходиться у КТ і в електричному полі, що створене рештою електронів.

Ключові слова: квантова точка, кількість станів, концентрація електронів, потенціал

Стаття постуила до редакції 14.06.2008; прийнята до друку 15.06.2009.

Вступ

Для передбачення нових якостей приладів, що побудовані на основі квантових точок (КТ), необхідний детальний аналіз енергетичних спектрів частинок у них. Варіювання розмірів та форми і легування – це два з багатьох можливих способів зміни властивостей КТ.

У різних фундаментальних та прикладних роботах для опису властивостей КТ використовується континуальна модель КТ, на основі якої можна одержати добре узгодження між теоретичними та експериментальними даними. У межах цієї моделі проведено перші теоретичні дослідження домішкових станів у КТ [1-4]. Отримано розв'язки рівняння Шредінгера для водневоподібної домішки.

Теоретичні та експериментальні дослідження показали [5-9], що у КТ можуть знаходитися декілька заряджених частинок. Зважаючи на це, було визначено залежність основних енергетичних рівнів донорів D^0 та D^- у сферичній КТ від радіуса та від різних обмежуючих потенціалів (прямокутний, параболічний, трикутний) [7].

Для розв'язання задач про багаточастинкову взаємодію у КТ поряд з різними наближеними методами, в основі яких лежать методи квантової механіки, використовуються, особливо для великого числа частинок, і статистичні методи, основи яких закладені роботами Томаса і Фермі.

Обчислення властивостей квантових точок вимагає самоузгодженого розв'язку рівняння Шредінгера і Пуассона для електронного газу.

Автори [10-11] одержали аналітичні розв'язки для рівняння Томаса-Фермі (Т-Ф) для двовимірної параболічної КТ, де електрони взаємодіють за допомогою логарифмічного потенціалу у присутності і відсутності магнітного поля. А в роботі [12] застосовано двовимірне наближення Томаса-Фермі для задачі про параболічну квантову точку, що складається з N електронів і домішки у центрі. У зв'язку з тим, що, згідно 2D-теорії Томаса-Фермі, квадрат імпульсу Фермі пропорційний концентрації електронів ($p_f^2 = 2\pi n$), то рівняння Томаса-Фермі розв'язується в аналітичному вигляді, на відміну від тривимірного (3D) випадку. У цій роботі вивчено зміну електронної густини, хімічного потенціалу, що викликані домішкою. Встановлено, що наявність домішки вносить значні зміни у названі характеристики, а особливо для малого числа електронів та сильного обмеження.

Реалістичною моделлю наногетероструктури є 3D КТ, яка знаходиться у матриці. Зважаючи на це, у запропонованій роботі на основі одночастинкового наближення визначено максимально можливу кількість станів у сферичній КТ як функцію її радіуса. Використовуючи ці результати, за допомогою варіаційного методу Томаса-Фермі визначено розподіл концентрації електронів та енергію, що припадає на один електрон, у залежності від розмірів КТ та кількості електронів. Тоді вже за відомим розподілом електронів одержано точний розв'язок рівняння Пуассона і визначено енергію взаємодії одного електрона із заданим розподілом зарядів. За допомогою варіаційного методу визначено енергію основного стану електрона, що

Таблиця

Залежність кількості станів у КТ від її радіуса					
Діапазон радіусів (a , Å)	[7; 22]	[23; 34]	[35; 46]	[47; 56]	57
Кількість станів (N)	2	8	18	34	58

знаходиться у КТ і в електричному полі системи зарядів. Конкретні розрахунки проведено для наногетеросистеми $\beta - \text{HgS} / \text{CdS}$.

I. Постановка задачі та її розв'язок

1.1. Одноелектронна задача

Розглядається квантова точка кристалу радіуса a . Діелектрична проникність КТ дорівнює ϵ_1 , ефективна маса електрона в ній $-m_1^*$. Вона поміщена у матрицю з діелектричною проникністю ϵ_2 , ефективна маса електрона у якій m_2^* . Для зручності в обчисленнях використано атомну систему одиниць ($e = m_e = \hbar = 1$).

Щоб провести розрахунок властивостей багатоелектронної КТ, необхідно визначити кількість одночастинкових станів у системі. Тому спочатку розглядається проста сферична КТ з одним електроном. Гамільтоніан такої системи запишеться так:

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{1}{2} \nabla \frac{1}{m^*(r)} \nabla + U(r), \quad (1)$$

$$m^*(r) = \begin{cases} m_1^*, & r < a, \\ m_2^*, & r \geq a \end{cases} \quad (2)$$

– ефективна маса електрона у відповідному кристалі. Потенціальна енергія, що зумовлена розривом зон (потенціал обмеження), у квантовій точці представляється формулою:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < a, \\ 0, & r \geq a, \end{cases} \quad U_0 > 0. \quad (3)$$

Врахування сферичної симетрії задачі дозволяє розв'язати рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1) у сферичних координатах. Розв'язок запишеться наступним чином:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \begin{cases} A \cdot j_l(kr), & r < a, \\ B \cdot h_l^{(1)}(i\chi r) & r \geq a, \end{cases} \quad (4)$$

де $Y_l^m(\theta, \varphi)$ – сферичні функції, $j_l(x)$ – сферична функція Бесселя I-го роду, $h_l^{(1)}(x)$ – сферична функція Ханкеля першого роду, $k^2 = 2m_1^*(E^0 + U_0)$, $\chi^2 = -2m_2^*E^0$.

Сталі A, B та енергія частинки E^0 знаходяться з граничних умов і умови нормування:

$$\begin{aligned} A j_l(kr) \Big|_{r=a} &= B h_l^{(1)}(i\chi r) \Big|_{r=a}, \\ \frac{A}{m_1^*} \frac{d}{dr} j_l(kr) \Big|_{r=a} &= \frac{B}{m_2^*} \frac{d}{dr} h_l^{(1)}(i\chi r) \Big|_{r=a}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\int d\vec{r} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 = 1.$$

Отже, з рівнянь (5) можна знайти кількість дискретних енергетичних рівнів, які існують при заданому радіусі КТ. Розв'язки при сталому l пронумеровано числами n , тому маємо $E^0 \equiv E_{l,n}^0$. Також враховано, що магнітне квантове число $m = -l, \dots, l$, а спин електрона $s = \pm 1/2$. Таким чином було визначено кількість зв'язаних станів, які можуть бути заповнені електронами з квантовими числами $\{l, n, m, s\}$. Результати подано у таблиці.

1.2. Метод Томаса-Фермі

Далі зроблено наближення, яке використовується у варіаційному методі Томаса-Фермі. Вибрано варіаційну функцію, що описує розподіл концентрації Z частинок ($Z \leq N$) у наногетероструктурі. Нехай

$$n(r, \alpha) = A \begin{cases} e^{-\alpha r} & r < a \\ e^{-\beta r^2} & r \geq a \end{cases}, \quad (6)$$

де параметр β можна знайти з умови неперервності функції концентрації на межі КТ: $\beta = \alpha/a$. Сталу величину A можна знайти з умови нормування на повне число розглядуваних електронів:

$$Z = \int d\vec{r} n(r, \alpha). \quad (7)$$

Якщо $n(r)$ – густина електронів, то середня кінетична енергія електрона, що перебуває на відстані r від центра КТ, запишеться так:

$$\bar{E}_k(r, \alpha) = \frac{3}{5} E_f = \frac{3}{5} \frac{1}{2m^*(r)} (3\pi^2 n(r, \alpha))^{2/3}. \quad (8)$$

Звідси повна кінетична енергія всіх електронів системи:

$$E_k(\alpha) = \int d\vec{r} \bar{E}_k(r, \alpha) n(r, \alpha). \quad (9)$$

Вираз для міжелектронної взаємодії одержується безпосередньо з формул електростатики:

$$E_p^{(1)}(\alpha) = \frac{1}{2\epsilon} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{n(r_1, \alpha) n(r_2, \alpha)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad \epsilon = \sqrt{\epsilon_1 \epsilon_2}. \quad (10)$$

Також враховано, що електрони у КТ перебувають у потенціальній ямі, тому:

$$E_p^{(2)}(\alpha) = \int d\vec{r} n(r, \alpha) U(r). \quad (11)$$

Враховуючи формули (8)-(11) можна визначити повну енергію, як функцію варіаційного параметра.

$$E(\alpha) = E_k(\alpha) + E_p^{(1)}(\alpha) + E_p^{(2)}(\alpha). \quad (12)$$

Мінімізація дозволить знайти повну енергію системи, параметр α , а також визначити концентрацію електронів.

1.3. Потенціал системи електронів

За відомою концентрацією електронів, можна знайти потенціал, що створений ними. Розподіл заряду гетеросистеми представиться виразом:

$$\rho(r) \equiv -n(r) = \begin{cases} -Ae^{-\alpha r}, & r < a, \\ -Ae^{-\frac{\alpha}{a}r^2}, & r \geq a. \end{cases} \quad (13)$$

Тут вважається, що величини α і A вже відомі. Тоді можна записати рівняння Пуассона, врахувавши сферичну симетрію задачі:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} \Phi_1(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \Phi_1(r) &= \frac{4\pi}{\epsilon_1} Ae^{-\alpha r}, & r < a, \\ \frac{d^2}{dr^2} \Phi_2(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \Phi_2(r) &= \frac{4\pi}{\epsilon_2} Ae^{-\frac{\alpha}{a}r^2}, & r \geq a. \end{aligned} \quad (14)$$

Розв'язки цих рівнянь відповідно матимуть вигляд:

$$\Phi(r) = \begin{cases} \Phi_1(r) = \frac{8A\pi e^{-\alpha r}}{\alpha^3 \epsilon_1 r} + \frac{4A\pi e^{-\alpha r}}{\alpha^2 \epsilon_1} - \frac{C_1}{r} + C_2, & r < a, \\ \Phi_2(r) = -\frac{A\pi^{3/2} a \sqrt{\frac{a}{\alpha}} \operatorname{Erf}\left(\frac{\alpha r}{\sqrt{\alpha a}}\right)}{\alpha \epsilon_2 r} - \frac{C_3}{r} + C_4, & r \geq a. \end{cases} \quad (15)$$

З умови рівності потенціалу нулю на ∞ можна вибрати сталу $C_4 = 0$. Враховуючи неперервність потенціалу і нормальної складової вектора індукції електричного поля, сталі C_2 і C_3 можна виразити через C_1 , а з теореми Гауса визначено сталу C_1 :

$$C_2 = \frac{2A\pi(2+\alpha a)(\epsilon_1(2+\alpha a) - 2\epsilon_2)e^{-\alpha a}}{\alpha^3 \epsilon_1 \epsilon_2 a} + \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{\epsilon_2 a} C_1, \quad (16)$$

$$C_3 = \frac{-1}{\epsilon_2 \alpha^3} \left(A \left[2\pi(2+\alpha a)^2 e^{-\alpha a} + (\pi \alpha a)^{3/2} \operatorname{Erf}\left(\sqrt{\alpha a}\right) \right] - \alpha^3 \epsilon_1 C_1 \right), \quad (17)$$

$$C_1 = \frac{Z}{\epsilon_1} + \frac{2\pi A(2+\alpha a)^2 e^{-\alpha a}}{\epsilon_1 \alpha^3} - \frac{A\pi^{3/2} \left(\frac{a}{\alpha}\right)^{3/2} \operatorname{Erfc}\left(\sqrt{\alpha a}\right)}{\epsilon_1}. \quad (18)$$

Отже, знайдено всі невідомі величини, а значить повністю визначено потенціал, що створений розподілом електронів у КТ.

1.4. Багатоелектронна КТ.

Розглядаються КТ таких розмірів, при яких можна, згідно з одноелектронним наближенням, вважати, що у КТ є не менше двох одноелектронних станів. Нехай у КТ є $(Z+1)$ електронів, причому $(Z+1) \leq N$. Електрони описуються розподілом зарядів $\rho(r)$. Енергія взаємодії одного електрона з рештою частинок визначатиметься за допомогою (15): $W(r_i) = -\Phi(r_i)$. Тут, як і всюди, використано атомну систему одиниць. Отже, гамільтоніан електрона, що знаходиться у КТ і у полі, що створене іншими зарядами у КТ запишеться так:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + W(r), \quad (19)$$

де \mathbf{H}_0 визначається виразом (1). Енергію основного стану визначено за допомогою варіаційного методу Рітца. Для цього пробну функцію вибрано у вигляді:

$$\Psi(r, \theta, \varphi; \delta, \gamma) = Y_l^m(\theta, \varphi) \begin{cases} D_1 \cdot \frac{\sin(\delta r)}{r}, & r < a, \\ D_2 \cdot \exp(-\gamma r), & r \geq a, \end{cases} \quad (20)$$

де $\gamma > 0$. Параметр D_2 та γ можна виразити через δ та D_1 , використовуючи умови неперервності хвильової функції (20) і потоку густини ймовірності на межі КТ. Енергію електрона в основному стані знайдено, використовуючи варіаційний принцип.

II. Аналіз одержаних результатів

Всі розрахунки проведено для наногетероструктури $\beta\text{-HgS}/\text{CdS}$, для якої $m_1^* = 0.036$, $m_2^* = 0.2$, $\epsilon_1 = 11.36$, $\epsilon_2 = 5.5$, $U_0 = 1.2$ eV. Результати обчислень залежності енергії, що припадає на один електрон, за формулою (12) від кількості електронів та радіуса КТ подано на рис. 1. Оскільки для заданого радіуса КТ у

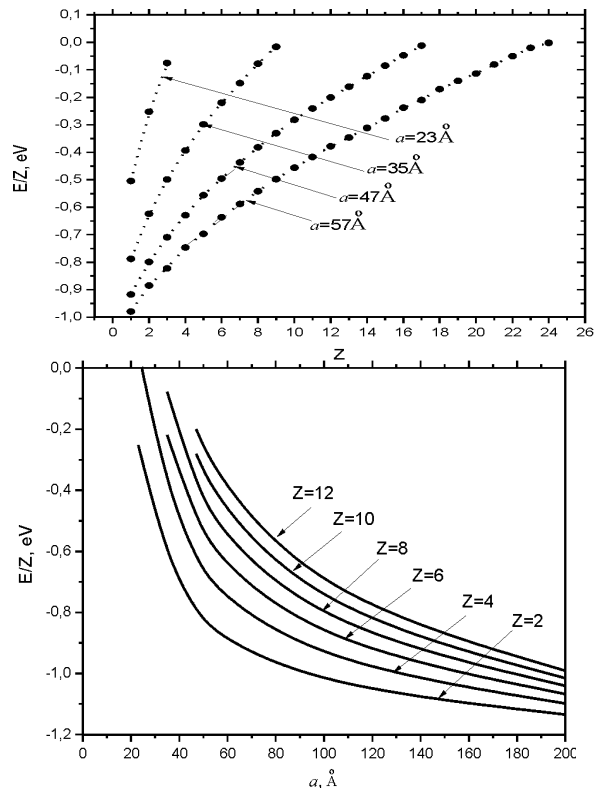


Рис. 1. Залежність енергії, що припадає на один електрон, визначеної за варіаційним методом Томаса-Фермі, від кількості електронів (зліва) і радіуса КТ(справа).

ній може знаходитись не більше N електронів, тому на рис. 1 графік залежності $E(Z)/Z$ при конкретному радіусі знаходиться в діапазоні значень $Z = 1, \dots, N$. З графіка видно, що при збільшенні кількості електронів енергія, що припадає на один електрон, збільшується. Це зумовлено зростанням кулонівського відштовхування між

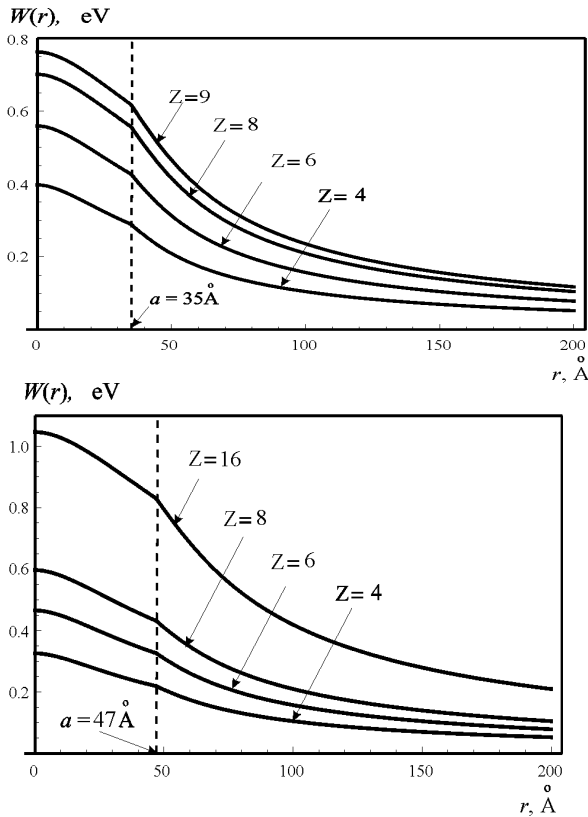


Рис. 2. Потенціальна енергія взаємодії даного електрона з Z електронами, які описуються густиною заряду (13), для різної кількості електронів Z і різних радіусів КТ.

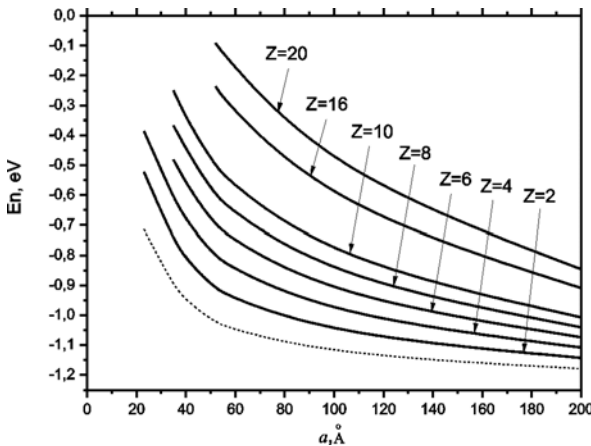


Рис. 3. Енергія основного стану електрона у КТ з Z електронами.

негативно зарядженими частинками. З рис. 1 також видно, що при однаковій кількості електронів у КТ величина (E/Z) зменшується при зростанні радіуса КТ. Причиною такої поведінки є зменшення впливу потенціалу обмеження при збільшенні радіуса.

Саме використання варіаційного методу Томаса-Фермі дозволило визначити розподіл зарядів у КТ, який використано для знаходження потенціалу системи зарядів. Тому на основі точного розв'язку рівняння Пуассона визначено потенціальну енергію взаємодії електрона з густиною зарядів, що створена Z електронами у КТ. Графіки цієї потенціальної енергії зображено на рис. 2. З графіків видно, що збільшення числа електронів збільшує потенціальну енергію їх взаємодії з даним електроном. Тут, як і всюди, враховано, що кількість електронів не перевищує кількість станів при заданому радіусі: $(Z + 1) \leq N$.

Енергію основного стану одного електрона (E_n), що знаходиться в КТ разом з Z іншими електронами, які створюють потенціал (15), для різних радіусів КТ визначено варіаційним методом. На рис. 3 подано залежності енергії електрона від радіуса КТ і від кількості електронів у КТ. Пунктирною лінією позначено основний (E_0) стан електрона у „незбуреній” КТ. Збільшення числа електронів спричинює зростання енергії одного розглядуваного електрона у наноструктурі. Це зумовлено збільшенням величини потенціалу (15). А збільшення радіуса КТ понижує енергію електрона, що пояснюється зменшенням впливу потенціалу обмеження (3).

Висновки

У роботі за допомогою одночастинкового наближення визначено кількість станів, які можуть бути зайняті електронами у сферичній КТ при заданому радіусі. Використання варіаційного методу Томаса-Фермі дало можливість визначити залежність розподілу концентрації електронів від їх кількості та розмірів КТ. Також за визначеним розподілом зарядів у КТ на основі точного розв'язку рівняння Пуассона визначено потенціал, що створений заданою кількістю електронів. Встановлено, що збільшення числа електронів збільшує потенціальну енергію взаємодії електрона з решетою електронів у КТ. Використовуючи варіаційним метод Рітца, визначено енергію основного стану одного електрона, що знаходиться у багатоелектронній КТ, показано, що збільшення числа електронів у КТ зумовлює зростання енергії основного стану одного електрона, а збільшення радіуса КТ понижує енергію системи, внаслідок зменшення впливу потенціальної ями і міжелектронної взаємодії.

- [1] J.Z. Zhu. Exact solution of hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well // *Phys. Rev. B*, **39**(12), pp. 8780-8783 (1989).
- [2] J.Z. Zhu. Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ // *Phys. Rev. B*, **41**(9), pp. 6001-6007 (1990).

- [3] C.C. Yang, L.C. Liu, and S.H. Chang. Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot // *Phys. Rev. B*, **58**(4), pp. 1954-1961 (1998).
- [4] М.В. Ткач, В.А. Головацький, Я.М. Березовський. Спектр і хвильові функції воднеподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // *Фіз. і хім. тверд. тіла*, **4**(2), сс. 213-220 (2003).
- [5] J.L. Zhu D.L. Lin, Y. Kawazoe. Energy levels of D^0 and D^- in graded quantum-well structures of GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs under magnetic fields // *Phys. Rev. B*, **54**(23), pp. 16786-16791 (1996).
- [6] S. Huan and S.P. Najda. Two-dimensional D^- centers // *Phys. Rev. Lett.* **65**(12), pp. 1486-1489 (1990).
- [7] R.K. Pandey, M.K. Harbola, V.A. Singh. Shallow Deep Transitions of Neutral and Charged Donor States in Semiconductor Quantum Dots // *Phys. Rev. B*, **70**(19), pp. 193308-193312 (2004).
- [8] F. Guffarth, R. Heitz, and other. Few-particle interactions in charged $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ quantum dots // *Phys. Rev. B*, **67**(23), pp. 235304-235313 (2003).
- [9] E. Anisimovas, A. Matulis. Energy spectra of few-electron quantum dots // *J. Phys. Condens. Matter*, **10**(3), pp. 601-615 (1998).
- [10] R. Pino. Exact solution of the Thomas-Fermi two-dimensional N -electron parabolic quantum dot // *Phys. Rev. B*, **58**(8), pp. 4644-4648 (1998).
- [11] R. Pino. Two-dimensional Thomas-Fermi parabolic quantum dot in a weak magnetic field // *Eur. Phys. J. B*, **13**, pp. 723- 730 (2000).
- [12] B. Gulveren, U. Atav, M. Sahin, M. Tomak. Parabolic quantum dot with N electrons and an impurity // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, **30**(1-2), pp. 143-149 (2005).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, R.Ya. Leshko

Properties of Multi-Electron Spherical Quantum Dots

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, Institute of Physics, Mathematics and Computer Science, Department of Theoretical Physics, 3 Stryiska St., Drohobych, Lviv Region, 82100 E-mail: leshkoroman@mail.ru

For a spherical β -HgS/CdS nanoheterostructure in the effective mass approximation the number of bound states which can be filled in a quantum dot was defined. On the basis of these results and the Thomas-Fermi variation method the distribution of electron concentration was calculated, and also the energy per electron was obtained. Since the distribution of charge density in the nanoheterostructure is known, the potential of the electron system was determined as well as the energy of an electron in a quantum dot and in the electric field made by the other electrons was calculated.

Key words: quantum dot, number of states, concentration of electrons, potential.