

ИССЛЕДОВАНИЕ КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ Si/SiO₂

*Калина ИСАКОВА, Денис НИКА, Артур АСКЕРОВ,
Надежда ЗИНЧЕНКО, Евгений ПОКАТИЛОВ*

Кафедра теоретической физики

În lucrare sunt prezentate cercetările distribuției potențialului în punctul cuantic din Si plasat în mediu dielectric SiO₂. Au fost cercetate dependențele distribuției potențialului de mărimea razei sferei din Si. Au fost comparate distribuțiile potențialului pentru diferite permitivități electrice ale sferei.

In this paper the investigations of the distribution of the coulomb interaction potential in silicon quantum dot imbedded in the dielectric medium from SiO₂ have been fulfilled. Dependence of the interaction potential on the Si-quantum dot radius has been obtained and investigated in details. The comparison between distributions of Coulomb interaction potentials with different permittivity of the quantum dot has been carried out.

Два последних десятилетия развития физики свидетельствуют о появлении нового направления в физике твёрдого тела и полупроводников, изучающего свойства наноразмерных структур: квантовых слоёв, квантовых нитей и квантовых точек. Существенный прогресс в развитии технологии изготовления таких структур [1-4], достигнутый за последнее десятилетие, стимулирует как интенсивные теоретические, так и экспериментальные исследования наноструктур различной формы [1-6]. Хорошо известно, что в квантовых точках, помещенных в вакуум или диэлектрическую среду, можно светом возбудить экситоны и после их рекомбинации наблюдать излучение света высокой монохроматичности [7]. Длина волны излучаемого света зависит от материальных и геометрических параметров квантовых точек и окружающей среды. Было также показано, что энергия возбужденных экситонных состояний может нерезонансно передаваться акцепторам энергии, локализованным вблизи квантовой точки. Этот процесс играет важную роль [1] в биомедицине в целях разрушения клеток новообразований направленным лазерным излучением и [2] в оптоэлектронике наноразмерных структур для создания оптических усилителей и оптических преобразователей частоты. Для теоретического изучения механизма передачи энергии от экситона к акцептору необходимо рассчитать энергетические спектры экситона. Для этого надо, в свою очередь, найти потенциал кулоновского электронно-дырочного взаимодействия.

Нами поставлена задача исследования распределения кулоновского потенциала электрического поля, создаваемого точечным зарядом, в квантовой точке из Si, находящейся в среде SiO₂. Рассматриваемая квантовая точка имеет сферическую форму и нанометровые размеры; расчеты проводились для точек размером 1 нм, 1,5 нм, 2 нм. Диэлектрическая проницаемость материала точки отличается от диэлектрической проницаемости среды. Оптические свойства таких квантовых точек экспериментально изучались в [7].

Исследованы зависимости распределения потенциала от размеров сферы и расположения заряда, а также выполнены модельные расчеты для различных диэлектрических проницаемостей точки и среды.

Теоретическая модель

Потенциал электрического поля находился из уравнения Максвелла:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \operatorname{grad} \varphi) = -4\pi\rho, \quad (1)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды, φ – потенциал поля, ρ – плотность электрического заряда. В рассматриваемом случае диэлектрическая проницаемость неоднородна, поэтому при взятии производных в уравнении (1) необходимо учитывать зависимость ε от координат. В этом случае уравнение (1) можно представить в виде:

$$\frac{\partial \varepsilon_x}{\partial x} \frac{\partial \varphi_x}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial^2 \varphi_x}{\partial x^2} + \frac{\partial \varepsilon_y}{\partial y} \frac{\partial \varphi_y}{\partial y} + \varepsilon \frac{\partial^2 \varphi_y}{\partial y^2} + \frac{\partial \varepsilon_z}{\partial z} \frac{\partial \varphi_z}{\partial z} + \varepsilon \frac{\partial^2 \varphi_z}{\partial z^2} = -4\pi\rho. \quad (2)$$

Для решения уравнения (2) использован численный метод конечных разностей. В соответствии с данным методом [8], уравнение (2) записывается в следующей форме:

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi(i+1, j, k) - \varphi(i-1, j, k)}{2\Delta x} \frac{\varepsilon(i+1, j, k) - \varepsilon(i-1, j, k)}{2\Delta x} + \\ & + \varepsilon \frac{\varphi(i+1, j, k) - 2\varphi(i, j, k) + \varphi(i-1, j, k)}{\Delta x^2} + \\ & + \frac{\varphi(i, j+1, k) - \varphi(i, j-1, k)}{2\Delta y} \frac{\varepsilon(i, j+1, k) - \varepsilon(i, j-1, k)}{2\Delta y} + \\ & + \varepsilon \frac{\varphi(i, j+1, k) - 2\varphi(i, j, k) + \varphi(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \\ & + \frac{\varphi(i, j, k+1) - \varphi(i, j, k-1)}{2\Delta z} \frac{\varepsilon(i, j, k+1) - \varepsilon(i, j, k-1)}{2\Delta z} + \\ & + \varepsilon \frac{\varphi(i, j, k+1) - 2\varphi(i, j, k) + \varphi(i, j, k-1)}{\Delta z^2} = -4\pi\rho(i, j, k). \end{aligned} \quad (3)$$

Уравнение (3) представляет собой систему неоднородных линейных уравнений относительно неизвестных значений потенциала в точках разбиения $\varphi(i, j, k)$. Данная система решена с помощью численного итерационного метода Якоби – Зейделя.

Граница расчетной области взята на расстоянии 2-3 радиусов сферы [9]. В качестве граничных условий выбраны значения классического сферического кулоновского потенциала с диэлектрической проницаемостью внешней среды.

Для учета плавности перехода диэлектрической проницаемости использована аппроксимирующая одномерная экспоненциальная функция:

$$f(r) = \begin{cases} \varepsilon_d, & r \leq R_d - dint \\ \frac{\varepsilon_d \cdot \exp[-(r - R_d) \cdot e_1] + \varepsilon_m \cdot \exp[(r - R_d) \cdot e_2]}{\exp[-(r - R_d) \cdot e_1] + \exp[(r - R_d) \cdot e_2]}, & R_d - dint < r < R_d + dext \\ \varepsilon_m, & r \geq R_d + dext \end{cases}, \quad (4)$$

где r – расстояние от центра сферы до расчетной точки, R – радиус сферы, $dint, dext$ – область аппроксимации внутри и снаружи сферы соответственно, $\varepsilon_m, \varepsilon_d$ – диэлектрические проницаемости среды и точки, e_1, e_2 – параметры. В работе использованы следующие величины параметров: $dint = dext = 0,2 \text{ nm}$, $e_1 = e_2 = 20$.

При расчете распределения потенциала точечный заряд заменен на размазанный по объему пятой части ячейки разбиения, поэтому в точке нахождения заряда потенциал имеет максимум конечного значения (см. рис. 1).

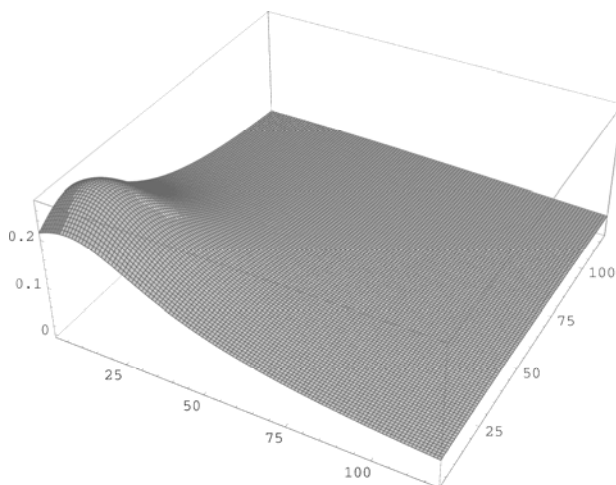


Рис.1. Распределение потенциала на поверхности расчетной области. Заряд находится вне сферы из Si.

Результаты и обсуждение

На рис. 2-4 показано распределение потенциала $\phi(r)$ в зависимости от положения заряда: в центре сферы (рис. 2), вблизи центра сферы (рис. 3) и в окружающей среде на расстоянии 0,75 нм от точки (рис. 4), а также показаны зависимости сферически-симметричного кулоновского потенциала от r с диэлектрическими проницаемостями внешней (пунктирная линия) и внутренней (штриховая линия) среды. Видно, что в случае, когда заряд находится вне сферы, потенциал электрического поля в ней практически совпадает со сферически-симметричным потенциалом, создаваемым точечным зарядом с диэлектрической проницаемостью внешней среды ϵ_m . В случае, когда заряд находится внутри сферы (рис. 2 и 3), потенциал электрического поля вблизи заряда больше похож на значение кулоновского потенциала с диэлектрической проницаемостью сферы ϵ_d . С увеличением расстояния от заряда к краям сферы кривая потенциала начинает плавно приближаться к сферическому кулоновскому потенциалу с диэлектрической проницаемостью внешней среды ϵ_m и вблизи границы расчетной области практически совпадает с ним.

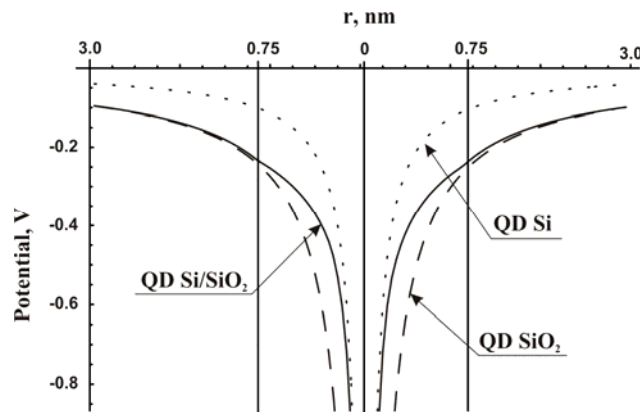


Рис.2. Распределение потенциала для заряда, находящегося в центре сферы.

Пунктирная линия — ϵ_d ; штриховая линия — ϵ_m ; сплошная линия – расчетный потенциал с аппроксимирующей функцией.

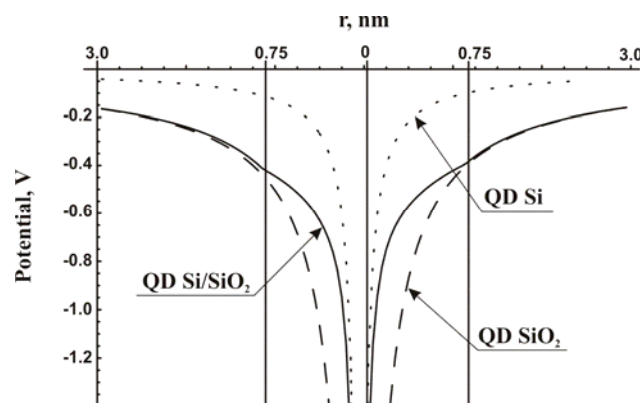


Рис.3. Распределение потенциала для заряда, находящегося вблизи центра сферы.

Заряд находится около центра точки. Пунктирная линия — ϵ_d ; штриховая линия — ϵ_m ; сплошная линия – расчетный потенциал с аппроксимирующей функцией.

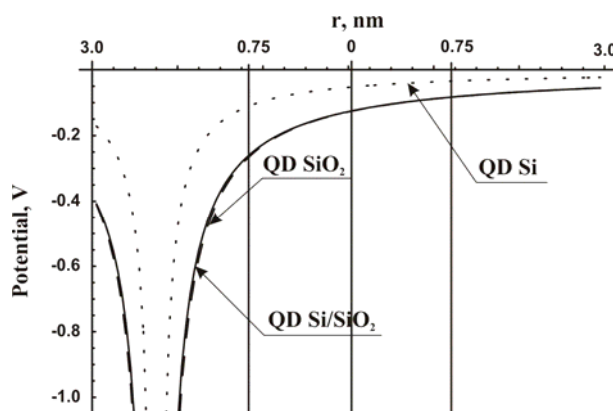


Рис.4. Распределение потенциала для заряда, находящегося вблизи центра сферы. Заряд находится вне точки. Пунктирная линия — ϵ_d ; штриховая линия — ϵ_m ; сплошная линия – расчетный потенциал с аппроксимирующей функцией.

На рис. 5 показана зависимость потенциала от диэлектрической проницаемости сферы. Видно, что с уменьшением различия в диэлектрических проницаемостях уменьшается излом потенциала на границе сферы и что потенциал по абсолютному значению увеличивается с уменьшением диэлектрической проницаемости сферы.

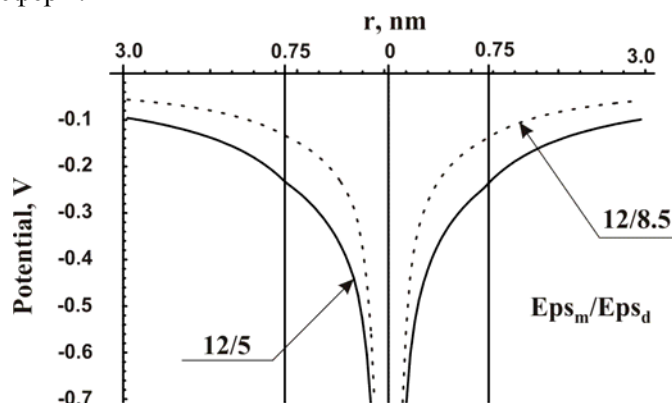


Рис.5. Распределение расчетного потенциала для различных диэлектрических проницаемостей внешней среды ϵ_m (заряд находится в центре сферы).

На рис. 6 представлена зависимость потенциала от радиуса сферы. Из этого графика следует, что потенциал внутри сферы растет по абсолютному значению с уменьшением радиуса сферы.

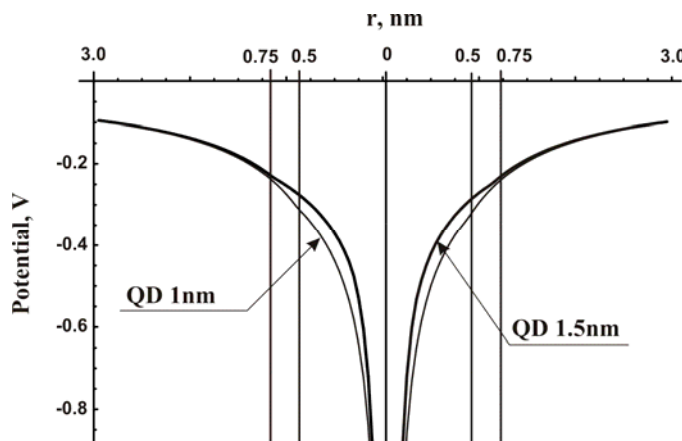


Рис.6. Распределение расчетного потенциала для сфер различных радиусов (заряд находится в центре сферы).

Выводы

В работе исследовано распределение кулоновского потенциала взаимодействия электрона и дырки в сфере из Si, помещенных в диэлектрическую матрицу из SiO₂. Исследованы зависимости распределения потенциала от размера сферы и величины диэлектрической проницаемости внутри сферы. Показано, что потенциал внутри сферы уменьшается по абсолютному значению с ростом радиуса сферы и с увеличением диэлектрической проницаемости сферы.

Литература:

1. Alivisatos A.P. Perspectives on the Physical Chemistry of Semiconductor Nanocrystals // J. Phys. Chem. – 1996. – Vol. 100. – P.13226.
2. Poole Ch. P, Owens Ch. P. Introduction to Nanotechnology. – John Wiley & Sons, Inc, Publ., 2003.
3. Efros Al., Lockwood D.J., Tsybeskov L. Semiconductor Nanocrystals: From Basic Principles to Applications, Series: Nanostructure Science & Technology. – Springer Publ., 2004.
4. Kovalev D., Gross E., Kuenzner E., Koch F., Timoshenko V. Yu., Fujii M. Resonant electronic energy transfer from excitons confined in silicon nanocrystals to oxygen molecules // Phys. Rev. Lett. – 2002. – Vol. 89. – P.137401.
5. Bakalova R., Ohba H., Zhelev Z., Nagase T., Jose R., Ishikawa M., Baba Y. Quantum dot anti-CD conjugates: are they potential photosensitizers or potentiators of classical photosensitizing agents in photodynamic therapy of cancer? // Nano Lett. – 2004. – Vol. 4. – P.1567.
6. Wang S., Gao R., Zhou F., Selke M. Nanomaterials and Singlet Oxygen Photosensitizers: Potential Applications in Photodynamic Therapy // J. Mat. Chem. – 2004. – Vol. 14. – P.487.
7. Timoshenko V.Yu., Lisachenko M.G., Kamenev B.V., Shalygina O.A., Kashkarov P.K., Heitmann J., Schmidt M., Zacharias M., Highly efficient sensitizing of erbium ion luminescence in size-controlled nanocrystalline Si/SiO₂ superlattice structures // Appl. Phys. Lett. – 2004. – Vol. 84. – P.2512.
8. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – Москва: Издательство МГУ им. М.В. Ломоносова, 2004, с.798.

Работа выполнена при финансовой поддержке фонда INTAS (грант 05-104-7656), а также государственных проектов ЗБ 06.406.036F и 06.35 CRF.

Prezentat la 02.08.2007