

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ**Система идеальных квантовых точек с кулоновским взаимодействием****А.М.Мандель, В.Б.Ошурко, С.М.Першин**

Построены волновые функции одноэлектронных состояний, локализованных на системе одноуровневых идеальных квантовых точек в полупроводниковой матрице. Стандартная теория Кейна, описывающая перенормировку эффективной массы электронов в объемных полупроводниках типа $A^{III}B^V$, впервые, насколько нам известно, трансформирована для квантовых точек малых размеров. Перенормированная масса электрона в квантовой точке зависит от энергии его основного состояния, которая, в свою очередь, зависит от этой массы. Таким образом, получается самосоглашенная задача для расчета энергии связи электрона. Рассчитан радиус дебаевской экранировки кулоновского взаимодействия в системе квантовых точек при комнатной температуре. Кулоновское отталкивание локализованных на точках электронов приводит к ограничению сверху на возможное число заполненных ими точек. Сформулировано условие для оптимальной концентрации квантовых точек. Построена классическая функция распределения вероятностей по числу заполненных точек. Установлено, что минимальным по энергии (и потому наиболее устойчивым) является состояние, в котором электронами заполнена ровно половина максимально возможного числа заполненных точек, причем это условие достаточно универсально. В частности, его можно использовать для оценки предельной эффективности диодных лазеров на квантовых точках.

Ключевые слова: система одноуровневых идеальных квантовых точек, кулоновское взаимодействие, энергия связи, трансформация теории Кейна для квантовых точек малых размеров, критические размеры идеальных точек, дебаевский радиус в системе точек, функция распределения по числу заполненных точек, условие оптимального заполнения.

1. Введение

Возможность создания оптических или оптически управляемых квантовых компьютеров, в частности компьютеров на квантовых точках, выполняющих роль кубитов, всегда являлась одной из самых впечатляющих проблем квантовой электроники [1, 2]. Однако в последнее время стало ясно, что взаимодействие в системе квантовых точек сложнее, чем предполагалось ранее [3]. Это особенно существенно для системы квантовых точек, погруженных в полупроводниковую матрицу. В данном случае взаимодействие с окружением может возмущать энергетическую структуру уровней точки столь сильно, что приближение изолированной точки станет непригодным. С другой стороны, правильный учет этого взаимодействия может позволить найти новые пути повышения эффективности электронных приборов (в частности, лазеров) на квантовых точках.

А.М.Мандель. Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127994 Москва, Вадковский пер., 3А; e-mail: arkadimandel@mail.ru

В.Б.Ошурко. Научный центр волновых исследований Института общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова, 38; Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127994 Москва, Вадковский пер., 3А

С.М.Першин. Научный центр волновых исследований Института общей физики им. А.М.Прохорова РАН, Россия, 119991 Москва, ул. Вавилова, 38

Поступила в редакцию 21 сентября 2018 г., после доработки – 21 декабря 2018 г.

Как известно, квантовыми точками называют нульмерные гетероструктуры, способные локализовать свободные заряды в своих потенциальных ямах. Идеальными их считают тогда, когда они способны локализовать только один электрон [4]. Для того чтобы такие точки не могли связать и дырки, энергетическая структура гетеросистемы должна быть ковариантной [5], т. е. как дно зоны проводимости, так и потолок валентной зоны материала точки должны быть ниже, чем в матрице (в материале барьера). Благодаря своему «чистому» спектру, а также простоте управления им внешними полями одноуровневые идеальные квантовые точки будут иметь множество применений в наноэлектронике и спинтронике, особенно в связи с проблемой квантовой обработки информации [6, 7].

В наших предыдущих работах [8–12] рассчитывались критические размеры, различные характеристики электронных состояний и их поведение во внешних полях для уединенных квантовых точек. При этом мы, вслед за подавляющим большинством других авторов, в качестве эффективной массы связанного электрона в материале точки использовали табличное значение, характерное для данной среды. Однако, как показал более тщательный анализ стандартной (k, p) -модели Кейна [13–15], эффективная масса электрона в квантовой точке малого размера перенормируется не так, как в объемном полупроводнике. Основное отличие в том, что масса зависит от энергии основного состояния локализованного на точке электрона. Энергия эта, в свою очередь, сама зависит от эффективной массы электрона и размера точки. Основная цель настоящей работы – предложить алгоритм определения энергии уровня и критических разме-

ров в системе одноуровневых идеальных квантовых точек с учетом «самосогласованности» эффективной массы с размерами точек, а также изучить кулоновское взаимодействие таких точек и их статистическое распределение по вероятностям заполнения при комнатной температуре. Сразу отметим, что очевидный следующий (и, по нашему мнению, решающий) шаг в этом направлении – учет обменного взаимодействия электронов в одноуровневых идеальных квантовых точках. Физически ясно, к чему это приведет. Поэтому в настоящей работе фактически исследуется фон, на котором будут взаимодействовать спины локализованных на таких точках электронов.

Работа имеет следующую структуру. В разд.2 формулируется и решается трансцендентное уравнение для энергии единственного связанного электронного уровня в идеальной квантовой точке. Его решение определяется размером точки, глубиной потенциальной ямы (скачком энергии дна зоны проводимости на гетерогранице), эффективными массами электронов в используемых материалах и, в меньшей степени, средней концентрацией точек. Для расчета эффективной массы стандартная модель Кейна впервые, насколько нам известно, модифицирована применительно к квантовым точкам малых размеров (т.е. фактически приведена в соответствие с правилами размерного квантования). Показано, что критический размер точки, при котором она остается одноуровневой, как и само значение энергии уровня, сложным образом зависят от средней концентрации точек. Принципиально важно, что ограничения снизу на размер точек, при котором в них появляется первый связанный уровень, в системе точек не существует – в отличие от случая уединенной точки.

В разд.3 рассматриваются вопросы экранировки кулоновского взаимодействия электронов, локализованных на одноуровневых идеальных квантовых точках, свободными носителями заряда в матрице. Мы ограничиваемся случаем собственных полупроводников при комнатной температуре. Экранировка при этих условиях имеет в целом классический дебаевский характер. Здесь же рассчитан ее эффективный радиус в системе точек.

В разд.4 исследуется влияние кулоновского отталкивания локализованных электронов на вероятность заполнения ими точек. Энергия такого отталкивания (при фиксированном размере точек) пропорциональна квадрату общего числа заполненных точек, а общая энергия связи электронов в точках – первой степени этого числа. Поэтому с определенного момента электрон вытесняется из потенциальной ямы. Следовательно, кулоновское взаимодействие приводит к ограничению сверху на возможное число заполненных электронами одноуровневых идеальных точек. Максимально возможное число заполненных точек пропорционально объему образца, диэлектрической проницаемости матрицы, энергии связи электрона и обратно пропорционально квадрату дебаевской длины. Наиболее устойчивым состоянием системы таких точек будет состояние, в котором число заполненных точек составит ровно половину от максимально возможного. Это соотношение универсально в том смысле, что оно не зависит от свойств материалов соответствующей гетероструктуры и концентрации точек. Обусловлено оно лишь упомянутыми выше зависимостями от числа заполненных точек отрицательной энергии связи и положительной энергии кулоновского отталкивания. Таким образом, становится бессмысленным излишне повы-

шать концентрацию одноуровневых идеальных квантовых точек, ибо они останутся «пустыми». Это, несомненно, имеет прямое отношение к эффективности полупроводниковых лазеров на квантовых точках. В данном разделе построена также классическая (максвелловская) функция распределения по числу заполненных точек.

2. Трансцендентное уравнение для энергии единственного уровня идеальной квантовой точки и его решение. Критические размеры одноуровневой идеальной точки

В монографиях [16, 17] были рассмотрены электронные состояния в системе δ -потенциалов. Наша ситуация отличается только тем, что мы описываем потенциальные ямы с конечными размерами и глубинами. Тем не менее и уравнение Шредингера для одноэлектронного состояния, и его решение (по сути функция Грина) во внешней матрице (в пространстве между потенциальными ямами, созданными точками) записываются точно так же, как и в упомянутых монографиях:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{ex}^*}\Delta\psi(r) = E\psi(r), \quad |r - r_i| > R, \quad (1)$$

$$\psi(r) = A \sum_i [\exp(-\kappa |r - r_i|)] / |r - r_i|. \quad (2)$$

Здесь Δ – трехмерный оператор Лапласа; $E < 0$ – энергия связи электрона в идеальной точке, которая, как обычно, отсчитывается от дна зоны проводимости материала барьера; m_{ex}^* – эффективная масса электрона в материале барьера; R – радиус точки; $i = 1, \dots, N$ – номер конкретной квантовой точки; $\kappa = \sqrt{-2m_{ex}^*E/\hbar^2}$ – волновое число связанного электрона в материале барьера; A – нормировочная постоянная, далее несущественная.

В дальнейшем будем рассматривать одноуровневые идеальные квантовые точки как сферы с радиусом R и концентрацией n , причем глубина потенциальной ямы определяется скачком энергии ΔE_c дна зоны проводимости на гетерогранице:

$$U(r) = \begin{cases} -\Delta E_c, & r < R, \\ 0, & r > R. \end{cases} \quad (3)$$

Следовательно, во внутренней области точки уравнение Шредингера для одночастичных состояний примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{in}^*(R)}\Delta\psi(r) - \Delta E_c\psi(r) = E\psi(r), \quad |r - r_i| < R, \quad (4)$$

где введена зависимость $m_{in}^*(R)$ эффективной массы электрона внутри одноуровневой идеальной точки от размера точки.

Везде далее будем исходить из условия

$$R \ll 1/\sqrt[3]{n}, \quad (5)$$

т.е. точки расположены не слишком плотно, так что среднее расстояние между соседними точками много больше их размеров. Тогда, следуя [16], в окрестности точки с

конкретным номером j радиус-вектор электрона \mathbf{r} можно «заморозить» во всех слагаемых (2), кроме одного, относящегося к данной точке. В результате решение (2) преобразуется к виду

$$\psi(\mathbf{r}) = A \left[\frac{\exp(-\kappa\rho_j)}{\rho_j} + \sum_{i \neq j} \frac{\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}} \right], \quad (6)$$

где $\rho_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|$, а $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ – расстояние между центрами точек. Снова следуя [16], сумму в (6) можно оценить, заменив ее интегралом:

$$\sum_{i \neq j} \frac{\exp(-\kappa r_{ij})}{r_{ij}} \rightarrow 4\pi n \int_0^\infty \exp(-\kappa r) r dr = \frac{4\pi n \hbar^2}{-2m_{\text{ex}}^* E}. \quad (7)$$

Теперь аналогично работам [8, 10, 12] выпишем решение (4) в области внутри точки:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{A \sin[\rho_j \sqrt{2m_{\text{in}}^*(R)(\Delta E_c + E)/\hbar}]}{\rho_j}. \quad (8)$$

В приближении (5) оно формально аналогично решению внутри уединенной точки.

Для замыкания задачи осталось лишь получить явную зависимость эффективной массы электрона от размера точки $m_{\text{in}}^*(R)$. Как известно, процесс перенормировки массы в объемном полупроводнике состава $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ (типа InAs, AlSb, GaAs и т. д.) описывает (k, p) -теория Кейна [13–15]. Нам необходимо трансформировать ее в соответствии с правилами размерного квантования, т. е. фактически учесть конечные размеры квантовой точки. Очень кратко напомним основные идеи модели Кейна, относящиеся к нашей ситуации. Перенормировка массы электрона в s -состоянии в окрестности минимума зоны проводимости (двукратно вырожденном по спину) происходит благодаря перемешиванию этого состояния с p -состоянием дырки в окрестности максимума валентной зоны (шестикратно вырожденным). Спин-орбитальное взаимодействие расщепляет это дырочное состояние на четырехкратно вырожденное (тяжелые дырки с проекцией $3/2$ полного момента и легкие дырки с проекцией $1/2$) и двукратно вырожденное, отстоящее от этого максимума на величину энергии спин-орбитального взаимодействия $-\Delta$ и также связанное с легкими дырками (полный момент $1/2$). В первом порядке теории возмущений энергия перемешивания – энергия Кейна E_p – пропорциональна квадрату матричного элемента импульса между указанными состояниями. Таким образом, полное уравнение Кейна – это уравнение для 8-компонентного «тетраспинора» с гамильтонианом 8×8 . В результате для эффективной массы электрона в окрестности минимума зоны проводимости теория Кейна дает следующее выражение:

$$\frac{m}{m_{\text{in}}^*} = 1 + \frac{E_p(3\varepsilon_g + 2\Delta)}{3\varepsilon_g(\varepsilon_g + \Delta)}, \quad (9)$$

где m – масса свободного электрона; ε_g – ширина запрещенной зоны; коэффициенты в правой части учитывают кратность вырождения примешиваемых состояний. (Формула (9) – самое простое выражение, учитывающее вклад только валентной зоны в перенормировку массы электрона на дне зоны проводимости. Вообще говоря, вклад в перенормировку дают все зоны, что обычно учитывают

введением небольшого подгоночного параметра в (9). Отметим, что исходные уравнения (1), (4) с перенормированной массой – это координатная часть уравнения Паули для огибающей волновой функции электрона на дне зоны проводимости, отщепленного от исходного 8-компонентного уравнения [13, 18].

Как привести это выражение в соответствие с правилами размерного квантования, т. е. фактически учесть «недостроенность» зонной структуры в квантовой точке малого размера? Согласно [15] определяющий параметр в (9) – ширина запрещенной зоны ε_g . Именно то, каким является данный полупроводник – узкозонным или широкозонным, и задает в первую очередь величину эффективной массы (и, кстати, фактора Ланде) электрона на дне зоны проводимости. Хорошо известно, что именно в узкозонных материалах электроны наиболее подвижны. Энергия спин-орбитального расщепления определяется в основном внутриатомными взаимодействиями, а энергия Кейна – параметр, мало различающийся для разных материалов, значительно превышает ширину запрещенной зоны.

Таким образом, недостроенность зонной структуры в квантовой точке малого размера должна прежде всего сказываться на величине ε_g – фактическом расстоянии (по энергетической шкале) между вершиной валентной зоны и дном зоны проводимости. Но тогда самый простой способ учесть размер квантовой точки – заменить ε_g на величину $\varepsilon_g + \Delta E_c - E$, которая является энергетической щелью между вершиной валентной зоны и основным состоянием электрона в квантовой точке. (Аналогичные дырочные эффекты в окрестности потолка валентной зоны мы не рассматриваем, потому что предполагаем ковариантность гетероструктуры, о чем шла речь выше.) В результате для эффективной массы получаем (см. также [19]) уравнение

$$\frac{m}{m_{\text{in}}^*(R)} = 1 + \frac{E_p[3(\varepsilon_g + \Delta E_c - E) + 2\Delta]}{3\varepsilon_g(\varepsilon_g + \Delta E_c - E)(\varepsilon_g + \Delta E_c - E + \Delta)}. \quad (10)$$

Далее с помощью алгоритма [16] строим вспомогательную функцию в окрестности j -й точки $\rho_j \psi(\rho_j)$, где $\psi(\rho_j)$ определяется из (6), (8), и ставим условие непрерывности логарифмической производной на границе точки $\rho_j = R$. Это приводит к трансцендентному уравнению для энергии связи электрона

$$\begin{aligned} & \sqrt{2m_{\text{in}}^*(R)(\Delta E_c + E)} \cot(R\sqrt{2m_{\text{in}}^*(R)(\Delta E_c + E)/\hbar}) \\ &= \frac{-\sqrt{2m_{\text{ex}}^* E} \exp(-R\sqrt{-2m_{\text{ex}}^* E/\hbar}) + 4\pi n \hbar^3 / (-2m_{\text{ex}}^* E)}{\exp(-R\sqrt{-2m_{\text{ex}}^* E/\hbar}) + 4\pi n \hbar^2 / (-2m_{\text{ex}}^* E)}, \quad (11) \end{aligned}$$

которое вместе с уравнением (10) уже позволяет ее рассчитывать.

Значительно упростит и прояснит физический смысл полученного уравнения переход к более естественным безразмерным единицам длины и энергии:

$$R \rightarrow R/l_0 = R\hbar/\sqrt{2m_{\text{ex}}^* \Delta E_c}, \quad E \rightarrow \epsilon = (-E)/\Delta E_c.$$

Здесь l_0 – дебройлевская длина для электрона с энергией ΔE_c , а ϵ – энергия связи в долях глубины потенциальной ямы. Уравнение (11) в новых единицах примет вид

$$\sqrt{\frac{m_{in}^*}{m_{ex}^*}(1-\epsilon)} \cot \left[\frac{R}{l_0} \sqrt{\frac{m_{in}^*}{m_{ex}^*}(1-\epsilon)} \right] = \frac{-\epsilon^{3/2} \exp(-R\sqrt{\epsilon}/l_0) + 4\pi n l_0^3}{\epsilon \exp(-R\sqrt{\epsilon}/l_0) + 4\pi n l_0^3 R} \quad (12)$$

Ясно, что перенормировка массы фактически эквивалентна изменению масштаба локализации электрона внутри точки.

Результаты расчета энергии связи при различных концентрациях квантовых точек приведены на рис.1. При этом использовались данные для ковариантной гетероструктуры InAs/AlSb из обзора [20], которые приведены в подписи к рисунку. Из рис.1 видно, начиная с какой концентрации квантовых точек становится ощутимым ее влияние на энергию связи.

Важнейший вопрос состоит в том, в каком диапазоне размеров квантовая точка остается одноуровневой, т.е. «вмещает» не более одного связанного электронного состояния. Для точного ответа на него необходимо числен-

но решить уравнение (12) в пределе $\epsilon \rightarrow 0$, когда оно сводится к уравнению

$$\sqrt{\frac{m_{in}^*(R)}{m_{ex}^*}} \cot \left[\frac{R}{l_0} \sqrt{\frac{m_{in}^*(R)}{m_{ex}^*}} \right] = \frac{l_0}{R}, \quad (13)$$

причем сама величина n непосредственно в формулу не входит. Отсюда сразу следует, что наименьший критический размер, т.е. минимальный радиус R_{min} , при котором в потенциальной яме появляется первый связанный уровень, равен нулю, в отличие от случая уединенных точек. Это вполне согласуется с результатами [16].

Наибольший критический размер квантовой точки определяется условием появления второго связанного уровня, после чего точка, естественно, перестает быть идеальной одноуровневой. Задача его нахождения для уединенных точек во внешнем магнитном поле решена в работах [8, 10], а во внешнем электрическом поле – в работе [12], правда в приближении $m_{in}^*(R) = m_{in}^*(\infty)$. Для системы точек, аппроксимируя $\cot x$ в окрестности второго нуля ($x = 3\pi/2$) линейной функцией*, из (13) можно получить

$$R_{max} = \frac{3\pi}{4} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{9\pi^2}} \right) \sqrt{\frac{m_{ex}^*}{m_{in}^*(R_{max})}} l_0 \approx 4.5 \sqrt{\frac{m_{ex}^*}{m_{in}^*(R_{max})}} l_0. \quad (14)$$

Решение этого уравнения совместно с (12) и (10) определяет диапазон идеальности сферических квантовых точек. В частности, для рассмотренной гетероструктуры InAs/AlSb радиус $R_{max} \approx 4.976l_0 \approx 1.64$ нм и, опять-таки, практически не зависит от концентрации точек.

Представляют интерес также зависимости энергии связанного уровня от концентрации квантовых точек. Они показаны на рис.2. Концентрация приведена в безразмерных единицах nl_0^3 . Заметим, что именно в таком виде она входит в уравнение для энергии связи (12). Верхний предел используемого диапазона концентраций соответствует $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Из рис.1, казалось бы, следует, что с ростом радиуса квантовой точки и, соответственно, модуля энергии основного состояния растет и чувствительность к изменению концентрации, но это не совсем так. Электроны в квантовых точках малых размеров более чувствительны к наличию соседних точек (по сути, соседних потенциальных ям) из-за значительного размера электронного облака. Наиболее наглядно это иллюстрирует следующее обстоятельство: уединенные точки при $R < R_{min}$ вообще не способны локализовать электрон, в то время как в системе точек (т.е. при достаточно большом n) он локализуется формально при сколь угодно малых размерах точек. Другими словами, электрон «виртуально присутствует» во множестве квантовых точек. (Можно сказать и так: совокупность точек образует одну «многоячеистую» потенциальную яму.) На наш взгляд, это имеет самое непосредственное отношение к возможности реализации квантовых вычислений в рассматриваемой системе.

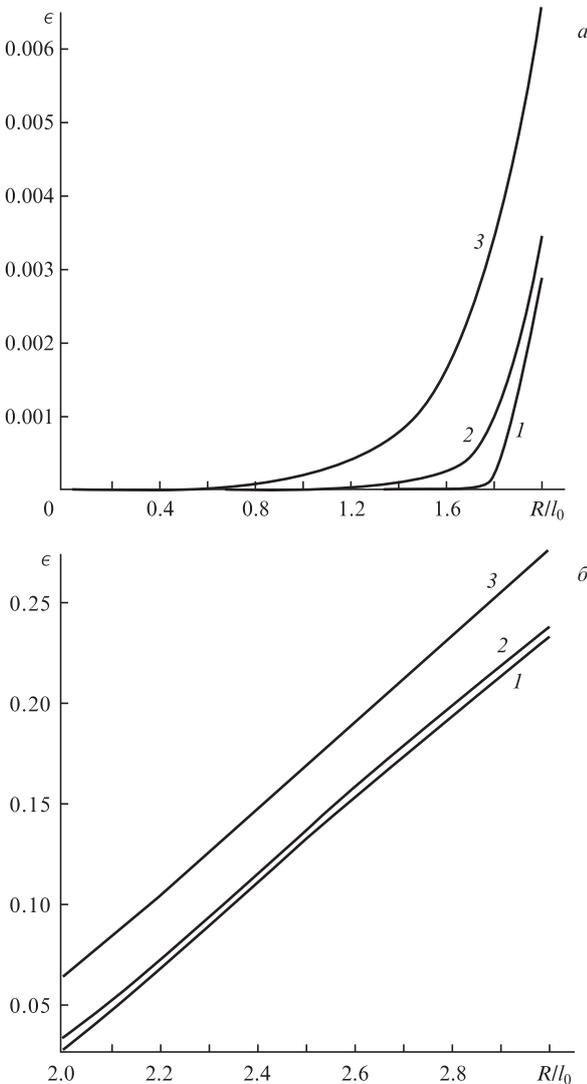


Рис.1. Зависимости энергии связи локализованного на одноуровневой идеальной квантовой точке электрона ϵ от радиуса точки для гетероструктуры InAs/AlSb со следующими параметрами [20]: $\Delta E_c = 2.2$ эВ, $\epsilon_g = 0.42$ эВ, $\Delta = 0.39$ эВ, $m_{in}^*(\infty) = 0.023m$ в InAs, $m_{ex}^* = 0.14m$ в AlSb. Концентрация $n = 10^{16}$ (1), 10^{17} (2) и 10^{18} см^{-3} (3), длина $l_0 \approx 0.33$ нм.

*Такая аппроксимация возможна практически при любых реалистичных соотношениях эффективных масс. В обзоре [20], например, для достаточно большого числа рассмотренных там гетероструктур контрпримеров мы не нашли.

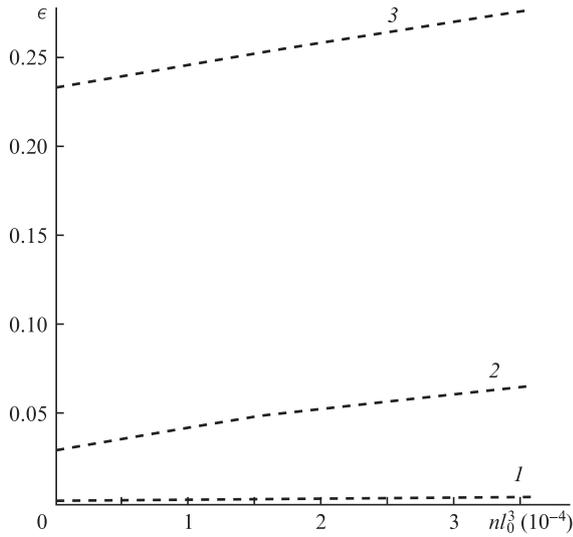


Рис.2. Зависимости энергии связи локализованного на одноуровневой идеальной квантовой точке электрона ϵ от концентрации точек для гетероструктуры InAs/AlSb, параметры которой приведены в подписи к рис.1, при $R = l_0$ (1), $2l_0$ (2) и $3l_0$ (3).

3. Механизмы экранировки заряда локализованных электронов

Квантовая точка представляет собой, по сути, потенциальную яму, в которой может сконцентрироваться отрицательный заряд. Существуют два наиболее простых механизма экранировки этого заряда в среде со свободными носителями. Первый – обычный механизм Дебая, т.е. формирование внешнего, достаточно протяженного и подвижного экранирующего облака вокруг локализованного на точке заряда. Второй – внедрение дырок в окрестность потенциального барьера на границе точки. Ясно, что отталкивающий дырки потенциал барьера* снижается под действием поля локализованного электрона, что в результате искажает структуру барьера на гетерогранице. Если суммарный потенциал в окрестности границы точки выше потолка валентной зоны в матрице, этот эффект имеет классический характер, если ниже, – мы имеем дело с квантовым внедрением дырок в потенциальный барьер. Похожий механизм характерен для более сильной, чем дебаевская, экранировки Рида и рассмотрен в работе [21] для протяженных линейных дислокаций. В итоге первый из описанных механизмов экспоненциально обрезает потенциал заполненной электроном квантовой точки на некотором расстоянии, а второй снижает эффективный заряд локализованного электрона.

Критерием применимости приближения слабой экранировки Дебая является условие превышения кинетической энергией заряда потенциальной энергии [15]:

$$\frac{e\varphi_0(\rho_j)}{k_B T} < 1, \quad (15)$$

где $\varphi_0(\rho_j)$ – потенциал, созданный локализованным на одноуровневой идеальной точке электроном. Именно возможные нарушения этого условия в окрестности границы точки создают условия для реализации второго механиз-

ма экранировки. В дальнейшем мы будем считать это условие выполненным. Ясно, что последовательное рассмотрение механизма сильной экранировки требует самосогласованного учета обратного влияния локализованных частиц на исходный потенциал гетероструктуры и исказит простые решения (6) и (8), на которых мы основывались. Грубо действие второго механизма экранировки можно учесть, подразумевая под зарядом электрона e некоторый эффективный заряд, меньший обычного.

Уравнение Пуассона, описывающее распределение потенциала в окрестности j -й точки с заполненным электронным состоянием, имеет вид

$$\Delta\varphi = -\frac{q_e + q_i}{\epsilon_0\epsilon} = \frac{\epsilon A^2 \exp(-2\kappa\rho_j)}{\epsilon_0\epsilon\rho_j^2} - \frac{2e^2 n_0 \varphi}{\epsilon_0\epsilon k_B T}. \quad (16)$$

Здесь q_e – плотность заряда, созданная локализованным электроном; q_i – плотность индуцированного заряда в «дебаевском облаке» свободных носителей; n_0 – концентрация свободных носителей заряда в материале барьера; ϵ – диэлектрическая проницаемость материала барьера. Выражение для плотности индуцированного заряда линейно связано по потенциалу согласно (15). Другими словами, в точке среды с потенциалом φ превышение Δn концентрацией свободных дырок n_h концентрации свободных электронов n_e оценивается как

$$\Delta n = n_h - n_e = n_0 \left[\exp\left(\frac{e\varphi}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{e\varphi}{k_B T}\right) \right] \approx 2n_0 \frac{e\varphi}{k_B T}. \quad (17)$$

Перепишывая уравнение (16) в каноническом виде, получаем

$$\frac{d^2\varphi}{d\rho_j^2} + \frac{2}{\rho_j} \frac{d\varphi}{d\rho_j} + \frac{\varphi}{L_D^2} = \frac{\epsilon A^2 \exp(-2\kappa\rho_j)}{\epsilon_0\epsilon\rho_j^2}, \quad (18)$$

где

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0\epsilon k_B T}{2e^2 n_0}} \quad (19)$$

– дебаевская длина экранировки. Наличие двойки в знаменателе связано с присутствием двух типов носителей заряда в собственном полупроводнике, создающих экранирующее дебаевское облако.

Уравнение (18) можно упростить, если учесть, что

$$1/\kappa \ll L_D. \quad (20)$$

В самом деле, при типичных для комнатной температуры концентрациях свободных носителей заряда в собственных полупроводниках $n_0 \approx 10^8 - 10^{11} \text{ см}^{-3}$ длина экранировки оценивается как $L_D \approx 3 - 300 \text{ мкм}$. Величина $1/\kappa$ может достигать таких значений только при энергиях связи локализованного электрона $\epsilon \approx 10^{-8} - 10^{-10} \text{ эВ}$. При таких ничтожно малых энергиях связанное состояние электрона в квантовой точке, разумеется, не будет устойчивым. Поэтому в правой части (18) можно сделать замену

$$A^2 \exp(-2\kappa\rho_j)/\rho_j^2 \rightarrow \delta(\rho_j). \quad (21)$$

Фактически это переход к приближению точечного заряда в уравнении (18), возможность которого обусловлена

* Для упоминавшейся уже гетероструктуры InAs/AlSb этот барьер – скачок энергии потолка валентной зоны на гетерогранице – составляет 0.2 эВ [20].

соотношениями (5) и (20). В результате решение (18) приобретает более знакомый вид:

$$\varphi(\rho_j) = \frac{\exp(-\rho_j/L_D)}{4\pi\epsilon_0\epsilon\rho_j}. \quad (22)$$

4. Кулоновское взаимодействие одноуровневых идеальных квантовых точек. Оптимальное число заполненных точек. Максвелловское распределение для числа заполненных точек

Локализованные на точках электроны, хотя и экранированные дебаевскими облаками, будут взаимодействовать друг с другом. Ясно, что энергия такого кулоновского отталкивания положительна и пропорциональна квадрату числа заполненных электронами точек. Поэтому при определенной концентрации квантовых точек энергия кулоновского отталкивания компенсирует суммарную отрицательную энергию связи электронов в одноуровневых идеальных точках, и уровень «вытеснится» из потенциальной ямы. Естественно, это ограничивает сверху число заполненных электронами квантовых точек. Соответственно и исходная концентрация рассматриваемых точек оказывается ограниченной.

Энергию кулоновского взаимодействия в расчете на одну заполненную точку можно оценить по тому же алгоритму, что и в (7), заменив сумму интегралом:

$$\epsilon_Q = \frac{e^2\tilde{n}}{\epsilon_0\epsilon} \int_R^L dr r \exp\left(-\frac{r}{L_D}\right) = \frac{e^2\tilde{n}}{\epsilon_0\epsilon} \left[(R + L_D)^2 \exp\left(-\frac{R}{L_D}\right) - (L + L_D)^2 \exp\left(-\frac{L}{L_D}\right) \right].$$

С учетом того, что линейный размер образца $L \approx 1$ см, дебаевская длина $L_D \approx 3-300$ мкм и радиус одноуровневой идеальной точки $R \approx 1-3$ нм, для энергии кулоновского отталкивания получаем следующую оценку:

$$\epsilon_Q \approx \frac{e^2\tilde{n}L_D^2}{\epsilon_0\epsilon} = \frac{e^2NL_D^2}{\epsilon_0\epsilon\Omega}, \quad (23)$$

где \tilde{n} – средняя концентрация заполненных электронами точек ($\tilde{n} \leq n$); $N = \tilde{n}\Omega$ – полное число этих точек; $\Omega \approx 1$ см³ – характерный объем образца.

Ясно, что квантовые точки перестанут заполняться электронами, когда это будет энергетически невыгодным, т. е. при условии

$$\epsilon_Q - \epsilon = 0.$$

Следовательно, максимально возможное число заполненных точек

$$N_{\max} = \frac{\epsilon_0\epsilon\Omega\epsilon}{e^2L_D^2} = \frac{2n_0\Omega\epsilon}{k_B T}. \quad (24)$$

С учетом приведенных выше значений постоянных, характерных для собственных полупроводников при комнатной температуре, получаем $N_{\max} \approx 10^8-10^{11}$.

Естественно, возникает вопрос о том, насколько обосновано первоначальное одночастичное приближение

(6)–(11) для определения энергии связи при наличии соседних точек и кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Оценка (24) его апостериори оправдывает. Из рис. 1 и 2 видно, что для ощутимого влияния на энергию связи нужна гораздо большая концентрация одноуровневых идеальных квантовых точек, чем дает оценка N_{\max} . Что касается кулоновского взаимодействия, то использованный при получении оценок (23), (24) подход аналогичен обычному приближению псевдопотенциала [16].

Наиболее устойчивым состоянием матрицы с одноуровневыми идеальными квантовыми точками будет, разумеется, состояние с минимальной энергией. Полная энергия системы точек с кулоновским взаимодействием составит $N(\epsilon_Q - \epsilon)$, а условие ее минимизации определит наиболее вероятное число заполненных электронами точек:

$$N_0 = -\frac{\epsilon_0\epsilon\Omega\epsilon}{4e^2L_D^2} = N_{\max}/2. \quad (25)$$

Последнее условие не зависит от конкретных параметров используемой гетероструктуры и в этом смысле универсально. Оно обусловлено, по сути, лишь тем, что полная отрицательная энергия связи пропорциональна числу заполненных точек, а положительная энергия кулоновского отталкивания – квадрату этого числа. Это полностью определяет положение минимума энергии. (Здесь просматривается очень любопытная аналогия с энергией основного состояния тяжелого ядра. Полная отрицательная ядерная энергия пропорциональна общему числу нуклонов, а положительная энергия кулоновского отталкивания – квадрату числа протонов. Более того, энергия сильного взаимодействия в расчете на один нуклон, как и энергия связи локализованного электрона, считается независимой от энергии кулоновского отталкивания.)

Построим теперь функцию статистического распределения (типа Максвелла – Больцмана – Гиббса) по числу заполненных электронами точек. Легко видеть, что минимальная полная энергия системы точек

$$E_{\min} = -\frac{\epsilon_0\epsilon\Omega\epsilon^2}{4e^2L_D^2},$$

а ее флуктуации за счет изменения числа заполненных электронами точек

$$\Delta E = -\frac{e^2L_D^2(N - N_0)^2}{\epsilon_0\epsilon\Omega}.$$

Таким образом, функция распределения для числа заполненных одноуровневых идеальных квантовых точек (или вероятность заполнения точки электроном) имеет следующий вид:

$$p(N) \propto \exp\left[-\frac{e^2L_D^2}{\epsilon_0\epsilon\Omega k_B T}(N - N_0)^2\right].$$

В заключение отметим, что в наших работах [8–12] исследованы некоторые способы управления волновой функцией и спиновыми состояниями локализованных на одноуровневых идеальных квантовых точках электронов с помощью внешних электрических и магнитных полей. Все это, в сочетании с чистым спектром одноуровневых

идеальных точек, делает описанные в работе системы чрезвычайно привлекательными для решения целого ряда задач микроэлектроники вообще и спинтроники и квантовой обработки информации в особенности. Что касается оценки максимальной эффективности лазеров на диодных квантовых точках, то этому вопросу мы намерены посвятить нашу следующую работу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант №3.6634.2017/6.7) и РФФИ (грант № 16-07-00289).

1. Sleator T., Weinfurter H. *Phys. Rev. Lett.*, **74** (20), 4087 (1995).
2. Cirac J.I., Zoller P. *Phys. Rev. Lett.*, **74** (20), 4091 (1995).
3. Kiyama H., Korsch A., Nagai N., Kanai Y., Matsumoto K., Hirakawa K., Oiwa A. *Nat. Sci. Rep.*, **8**, 13188 (2018).
4. Леденцов В.М., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. *ФТП*, **32**, 385 (1998).
5. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. *Физика низкоразмерных систем* (СПб.: Наука, 2001).
6. Ивченко Е.Л. *УФН*, **128** (8), 869 (2012) [*Phys. Usp.*, **55**, 809 (2012)].
7. Dyakonov M.I. (Ed.) *Spin Physics in Semiconductors* (Berlin: Springer, 2008).
8. Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Оптич. журн.*, **82** (5), 3 (2015).
9. Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Оптич. журн.*, **82** (5), 11 (2015).
10. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Шарц А.А. *Радиотехника и электроника*, **60**, 1073 (2015).
11. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Электромагнитные волны и электронные системы*, **19** (6), 67 (2014).
12. Мандель А.М., Ошурко В.Б. *Квантовая электроника*, **48** (1), 49 (2018) [*Quantum Electron.*, **48** (1), 49 (2018)].
13. Kane E.O. *J. Phys. Chem. Solids*, No.1, 249 (1957).
14. Roth L.M., Lax B., Zwerling S. *Phys. Rev.*, **114**, 90 (1959).
15. Ансельм А.И. *Введение в теорию полупроводников* (М.: Наука, 1978).
16. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М.: Наука, 1971).
17. Демков Ю.Н., Островский В.Н. *Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике* (Л.: Изд-во ЛГУ, 1975).
18. Келдыш Л.В. *ЖЭТФ*, **45** (8), 364 (1963) [*Sov. Phys. JETP*, **18** (1), 253 (1964)].
19. Ивченко Е.Л., Киселев А.А. *Письма в ЖЭТФ*, **67** (1), 41 (1998).
20. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
21. Шикин В.Б., Шикина Ю.В. *УФН*, **38**, 887 (1995) [*Phys. Usp.*, **38**, 845 (1995)].