

## Двухэлектронные состояния в двойной квантовой точке в постоянном электрическом поле

© В.А. Бурдов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
603600 Нижний Новгород, Россия

E-mail: burdov@phys.unn.runnet.ru

(Поступила в Редакцию 22 июня 2000 г.

В окончательной редакции 4 сентября 2000 г.)

Аналитически найдены волновые функции стационарных состояний и спектр двухэлектронной системы в симметричной двойной квантовой точке. Показано, что в основном состоянии, в отсутствие внешнего электрического поля, электроны вследствие кулоновской блокады не могут находиться вместе в одной квантовой точке. Во внешнем электрическом поле ситуация меняется. При достижении некоторого критического значения напряженности поля вероятность обнаружения обоих электронов в одной квантовой точке скачком возрастает от нуля до единицы.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 00-02-17488).

Гетероструктуры, содержащие полупроводниковые квантовые точки, являются перспективным материалом современной опто- и наноэлектроники, в связи с чем в последние годы ведется интенсивное исследование их оптических и транспортных свойств. Тенденция к уменьшению размеров различных полупроводниковых элементов диктует необходимость получения и исследования квантовых точек как можно меньших размеров, например в несколько нанометров [1–5].

Гетероструктуры с квантовыми точками активно рассматриваются в качестве источников люминесценции [6–8], в связи с этим во многих теоретических работах проводились вычисления электронных спектров в квантовых точках (см., например, работы [4,5]). При этом экспериментально наблюдалось, как правило, излучение, полученное при переходах между уровнями размерного квантования. В настоящей работе показано, что, если образовать структуру из двух туннельно связанных квантовых точек (двойную квантовую точку) с двумя электронами, в ней появляются квантовые переходы совершенно иного типа, обусловленные кулоновским межэлектронным взаимодействием. При этом частота излучения фотона в результате подобного перехода будет заметно отличаться не только величиной, но и характером зависимости от размеров квантовых точек.

Гетероструктуры с двойной квантовой точкой интересны еще и тем, что в них можно управляемым и контролируемым образом перемещать электронную плотность, например, из одной квантовой точки в соседнюю, в связи с чем обсуждается возможность использования двойной квантовой точки в качестве базового элемента при квантовых вычислениях [9]. Известно, однако, что кулоновское взаимодействие в квантовых точках является существенным, поэтому представляют интерес расчет электронной плотности в двойной квантовой точке именно с учетом межэлектронного взаимодействия (в том случае, когда количество электронов больше

одного), а также характер изменения плотности заряда под действием внешнего электрического поля.

Ранее производился расчет электронных спектров в двойной квантовой точке как в отсутствие внешних полей [10], так и в постоянных магнитном [11] и поперечном электрическом [12] полях. Двухэлектронный спектр в продольном электрическом поле рассчитывался ранее лишь численно [13] для квантовых точек больших размеров и прямоугольной формы.

В настоящей работе рассмотрена система двух одинаковых туннельно связанных сферических квантовых точек радиусом  $R$  с двумя электронами в постоянном электрическом поле напряженности  $E$ , направленном по оси структуры, и аналитически рассчитаны двухэлектронный спектр и распределение заряда в точках в зависимости от величины внешнего поля.

### 1. Энергетический спектр и распределение электронов

Строгий расчет двухэлектронного спектра и волновых функций в двойной квантовой точке возможен, по всей видимости, лишь численно, поэтому здесь для получения более наглядных аналитических результатов мы используем некоторые упрощающие приближения. В частности, будем полагать потенциальный барьер между квантовыми точками достаточно высоким (например, в случае перехода Si/SiO<sub>2</sub>, по данным работ [2,4], высота барьера составляет 3.2 eV), и, следовательно, ввиду слабости туннельной связи между квантовыми точками энергия расщепления уровней  $\Delta$  окажется экспоненциально малой величиной по высоте и ширине барьера. Оценки показывают, что величина  $\Delta$  может составлять  $10^{-2}$  eV, если расстояние между центрами квантовых точек  $2L$  не превышает удвоенного диаметра точки.

В то же время характерная энергия перехода, обусловленная размерным квантованием, имеет порядок 1 eV

при размерах квантовых точек порядка 2 nm и существенно превышает не только энергию расщепления  $\Delta$ , но и энергию кулоновского взаимодействия и тепловую энергию при комнатной температуре. По этой причине здесь мы вправе ограничиться двухуровневым приближением, считая более высокие уровни не вовлеченными в электронную динамику.

Оператор Гамильтона двухэлектронной системы запишем в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1) + V(\mathbf{r}_2) + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

где  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  — одночастичный оператор Гамильтона в двойной квантовой точке, собственные функции которого есть  $\chi_{0,1}(\mathbf{r})$ , а собственные значения  $E_{0,1}$ ;  $V(\mathbf{r})$  — потенциальная энергия электрона во внешнем поле, а  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  — энергия взаимодействия между электронами, причем  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_{\text{int}}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ .

Основываясь на двухуровневом приближении, двухэлектронную волновую функцию будем искать в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i,j=0}^1 C_{ij} \chi_i(\mathbf{r}_1) \chi_j(\mathbf{r}_2),$$

где  $C_{ij}$  — постоянные коэффициенты разложения. Поскольку в рассматриваемой задаче отсутствует магнитное поле, спиновую часть волновой функции будем опускать.

В результате стандартной процедуры [14] решения уравнения на собственные функции  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и собственные значения  $\mathcal{E}$  оператора Гамильтона  $\hat{H}$  придем к следующему уравнению для коэффициентов разложения  $C_{ij}$ :

$$C_{ij}(\mathcal{E} - E_i - E_j) = \sum_{n=0}^1 C_{nj} V_{in} + \sum_{n=0}^1 C_{in} V_{jn} + \sum_{n,m=0}^1 C_{nm} V_{in}^{jm} \quad (1)$$

с матричными элементами

$$V_{in} = \langle \chi_i(\mathbf{r}) | V(\mathbf{r}) | \chi_n(\mathbf{r}) \rangle,$$

$$V_{in}^{jm} = \langle \chi_i(\mathbf{r}_1) \chi_j(\mathbf{r}_2) | V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \chi_n(\mathbf{r}_1) \chi_m(\mathbf{r}_2) \rangle.$$

Не конкретизируя вид функций  $V(\mathbf{r})$  и  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , можно тем не менее сделать некоторые выводы о значениях матричных элементов, основываясь на свойствах симметрии энергии взаимодействия  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  относительно перестановок частиц, а также симметрии одночастичных волновых функций  $\chi_j(\mathbf{r})$  относительно отражений  $z \rightarrow -z$ .

В частности, несложно показать, что в приближении бесконечно высокого барьера одночастичные диагональные матричные элементы одинаковы:  $V_{00} = V_{11} \equiv X$ , так же как и недиагональные:  $V_{01} = V_{10} \equiv W$ . Из шестнадцати матричных элементов, отвечающих парному взаимодействию, отличными от нуля оказываются восемь, причем по четыре из них имеют одинаковые значения:  $V_{00}^{00} = V_{11}^{11} = V_{00}^{11} = V_{11}^{00} \equiv U$ ,  $V_{01}^{01} = V_{10}^{10} = V_{01}^{10} = V_{10}^{01} \equiv V$ . Конкретные выражения

для  $X, W, U$  и  $V$  будут получены позднее. Подстановка матричных элементов  $V_{ij}$  и  $V_{in}^{jm}$  в (1) приводит к системе четырех уравнений для коэффициентов  $C_{ij}$ , условие существования нетривиальных решений которой записывается в виде

$$(\varepsilon + V)[(\varepsilon + V)(\varepsilon - V)^2 - 4W^2(\varepsilon + V) - (\varepsilon - V)\Delta^2] = 0, \quad (2)$$

где  $\varepsilon = \mathcal{E} - U - 2X - \hbar^2 \pi^2 / mR^2$  (везде далее с целью упрощения расчетов будем использовать приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы).

Одно из четырех значений энергии

$$\varepsilon_1 = -V, \quad (3)$$

всегда соответствует первому возбужденному состоянию, а волновая функция данного состояния является антисимметричной по перестановкам частиц и не зависит от величины приложенного внешнего поля

$$\Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\Psi_L(\mathbf{r}_1)\Psi_R(\mathbf{r}_2) - \Psi_R(\mathbf{r}_1)\Psi_L(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}}. \quad (4)$$

Здесь  $\Psi_{L,R}(\mathbf{r})$  представляют собой одноэлектронные волновые функции основного состояния соответственно в левой и правой квантовых точках. Энергии трех остальных состояний находятся как решения уравнений третьей степени, получающегося из (2), а волновые функции этих состояний симметричны относительно перестановок частиц и описываются следующим общим выражением:

$$\begin{aligned} \Psi_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{(\varepsilon_j + V)[(\varepsilon_j - V - 2W)\Psi_L(\mathbf{r}_1)\Psi_L(\mathbf{r}_2) + (\varepsilon_j - V + 2W)\Psi_R(\mathbf{r}_1)\Psi_R(\mathbf{r}_2)]}{\sqrt{2}\sqrt{(\varepsilon_j^2 - V^2)^2 + \Delta^2(\varepsilon_j - V)^2 + 4W^2(\varepsilon_j + V)^2}} \\ &\quad - \frac{\Delta(\varepsilon_j - V)[\Psi_L(\mathbf{r}_1)\Psi_R(\mathbf{r}_2) + \Psi_R(\mathbf{r}_1)\Psi_L(\mathbf{r}_2)]}{\sqrt{2}\sqrt{(\varepsilon_j^2 - V^2)^2 + \Delta^2(\varepsilon_j - V)^2 + 4W^2(\varepsilon_j + V)^2}}, \\ & \quad j = 0, 2, 3. \end{aligned} \quad (5)$$

Исследуем более детально решения уравнения (2) и распределение электронной плотности в квантовых точках.

Начнем со случая нулевого внешнего поля. При этом  $W = 0$ , и уравнение (2) легко решается, что дает

$$\varepsilon_0 = -\sqrt{V^2 + \Delta^2}, \quad \varepsilon_2 = V, \quad \varepsilon_3 = \sqrt{V^2 + \Delta^2}, \quad (6)$$

а значение  $\varepsilon_1$  было получено ранее (см. (3)). Видно, что кулоновское взаимодействие приводит к общему сдвигу уровней энергии на величину  $U + 2X$ , относительно которой уже две пары уровней располагаются симметрично — выше и ниже, а также к снятию вырождения среднего уровня.

Как уже отмечалось выше, кулоновское взаимодействие между частицами порождает новые возможные

квантовые переходы. В данном случае можно говорить, по-видимому, о трех переходах:  $0 \leftrightarrow 2$ ,  $0 \leftrightarrow 3$  и  $2 \leftrightarrow 3$ . Первое же возбужденное состояние в силу антисимметрии относительно перестановок частиц не может быть связано посредством внешнего электрического поля (оператор взаимодействия частиц с внешним полем строго симметричен) ни с одним из симметричных состояний (5). Поэтому переходов из первого состояния или в первое состояние не будет.

Кроме того, учтем, что матричный элемент кулоновского взаимодействия  $V$  по порядку величины может быть оценен как  $e^2/\epsilon R$ , где  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость (более точные выражения будут получены далее, см. (12) и (14)), что составляет величину, примерно равную 0.1 eV. Величина же энергетического расщепления  $\Delta$  как минимум на порядок меньше, и, следовательно, в отсутствие электрического поля энергия перехода между вторым и третьим уровнями составляет величину, меньшую  $10^{-3}$  eV, что не превосходит характерного значения уширения уровней ( $\gtrsim 10^{-3}$  eV). По этой причине переход  $2 \leftrightarrow 3$ , скорее всего, также не сможет проявиться в реальном эксперименте.

В то же время значение энергии перехода с пары верхних уровней в основное состояние составляет приблизительно  $2V$  ( $\sim 0.1$  eV), что значительно превосходит (примерно на два порядка) величину уширения уровней. Следовательно, в условиях, когда температура достаточно низкая и фононы практически отсутствуют, можно получить излучение на частоте  $2V/\hbar$ , которая оказывается примерно на порядок меньше частоты переходов между уровнями размерного квантования при размерах квантовых точек в несколько нанометров. Следует заметить также, что частоты переходов между "кулоновскими" уровнями (6) и уровнями размерного квантования по-разному зависят от радиуса квантовых точек: как  $R^{-1}$  и  $R^{-2}$  соответственно. Поэтому дальнейшее уменьшение размеров квантовых точек повлечет за собой еще большее расхождение значений частот переходов и, напротив, увеличение размеров приведет к сближению этих значений.

Волновые функции стационарных состояний, за исключением первого возбужденного, получаются из (5) обращением в нуль матричного элемента  $W$ . Используя (4) и (5) при  $W = 0$ , можно получить двухчастичные вероятности симметричного  $P_S^{(j)}$  или асимметричного  $P_A^{(j)}$  расположения электронов в двойной квантовой точке, когда они находятся соответственно в разных точках или в какой-то одной.

Для основного состояния будем иметь

$$P_S^{(0)} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{V}{\sqrt{V^2 + \Delta^2}} \right),$$

$$P_A^{(0)} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{V}{\sqrt{V^2 + \Delta^2}} \right). \quad (7)$$

В условиях, когда кулоновское взаимодействие достаточно сильное ( $V \gg \Delta$ ), что по оценкам и имеет место в

нашей задаче, вероятность нахождения обоих электронов в одной точке оказывается малой и равной приблизительно  $(\Delta/2V)^2$ , в то время как вероятность обнаружения электронов в разных точках близка к единице.

В первом возбужденном состоянии вообще невозможно обнаружить оба электрона вместе — в одной квантовой точке. С вероятностью, равной единице, кулоновское взаимодействие максимально разводит электроны по разным точкам.

Во втором возбужденном состоянии ситуация меняется на обратную. С единичной вероятностью электроны находятся в какой-то одной квантовой точке и не могут быть обнаружены в разных.

Наконец, в последнем случае — в третьем возбужденном состоянии — получаем  $P_A^{(3)} = P_S^{(0)}$  и  $P_S^{(3)} = P_A^{(0)}$ , и с хорошей степенью точности можно считать, что электроны находятся в какой-то одной квантовой точке.

Естественной причиной расхождения электронов по разным квантовым точкам в основном состоянии является кулоновское отталкивание. Можно сказать, что в данном случае имеет место своего рода запрет на туннелирование электрона из одной точки в другую, если там уже находится второй электрон, — явление, называемое кулоновской блокадой туннелирования [15,16]. Для преодоления кулоновской блокады необходимо приложить некоторые дополнительные внешние усилия, например включить постоянное электрическое поле, направленное по оси двойной квантовой точки. Рассчитаем далее спектр и распределение электронов в квантовых точках в присутствии постоянного электрического поля.

Значения энергии основного, а также второго и третьего возбужденных состояний подчиняются уравнению третьей степени, получающемуся из (2). Его точное решение возможно лишь в неявном, так называемом тригонометрическом, виде [17] и является довольно громоздким. Поэтому далее будет использовано приближенное решение уравнения (2) с учетом малости энергии  $\Delta$  по сравнению с кулоновской энергией  $V$ .

Задав малые отклонения от решений уравнения (2), полученных в нулевом приближении (т.е. при  $\Delta = 0$ ), и пренебрегая в (2) третьей степенью этих малых отклонений, получим

$$\varepsilon_0 = \begin{cases} -\frac{v^2 + w^2 + \sqrt{(v^2 - w^2)^2 + 2V^2 \Delta^2}}{2V}, & |W| \leq V, \\ -|W| - \sqrt{(V - |W|)^2 + \Delta^2/2}, & |W| \geq V, \end{cases} \quad (8)$$

$$\varepsilon_2 = \begin{cases} V + \frac{4W^2 + \Delta^2/4 - \sqrt{4W^2(V - |W|)^2 + (\Delta^2/4)^2 + 2W^2 \Delta^2}}{V - 3|W|}, & |W| \leq V, \\ \frac{\sqrt{(v^2 - w^2 - \Delta^2/4)^2 + 2V^2 \Delta^2} - v^2 - w^2 - \Delta^2/4}{2V}, & |W| \geq V, \end{cases} \quad (9)$$

$$\varepsilon_3 = V + \Delta^2/4V + \sqrt{4W^2 + (\Delta^2/4V)^2}. \quad (10)$$

Точное значение энергии первого возбужденного состояния было получено нами ранее (см. (3)).

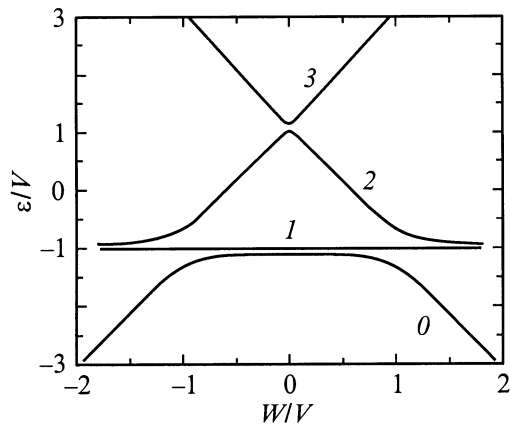


Рис. 1. Энергетический спектр системы при  $\Delta/V = 0.5$ .

Функциональные зависимости  $\epsilon_j(W)$ , вычисленные по формулам (3), (8)–(10), показаны на рис. 1 (цифры, стоящие рядом с кривыми, соответствуют номеру стационарного состояния). В силу полной пространственной симметрии двойной квантовой точки энергетический спектр зависит не от направления поля, а только от его величины. Поэтому представленные на рис. 1 кривые строго симметричны.

Найдем теперь двухэлектронные вероятности и проанализируем их зависимость от величины внешнего поля. Заметим, что в отличие от случая нулевого поля теперь вместо вероятности  $P_A^{(j)}$  имеет смысл ввести вероятности  $P_{LL}^{(j)}$  и  $P_{RR}^{(j)}$  нахождения обоих электронов соответственно в левой и правой квантовых точках, которые уже не равны друг другу, поскольку электрическое поле нарушает симметрию системы.

Для первого возбужденного состояния все вероятности остаются теми же, что и в отсутствие поля, т.е.  $P_{LL}^{(1)} = P_{RR}^{(1)} = 0$ ,  $P_S^{(1)} = 1$ , а для оставшихся трех состояний несложно получить

$$\begin{aligned}
 P_{LL}^{(j)} &= \frac{1}{2} \\
 &\times \frac{(\epsilon_j^2 - V^2)^2 + 4W^2(\epsilon_j + V)^2 - 4W(\epsilon_j + V)(\epsilon_j^2 - V^2)}{(\epsilon_j^2 - V^2)^2 + \Delta^2(\epsilon_j - V)^2 + 4W^2(\epsilon_j + V)^2}, \\
 P_S^{(j)} &= \frac{(\epsilon_j - V)^2 \Delta^2}{(\epsilon_j^2 - V^2)^2 + \Delta^2(\epsilon_j - V)^2 + 4W^2(\epsilon_j + V)^2}, \\
 P_{RR}^{(j)} &= \frac{1}{2} \\
 &\times \frac{(\epsilon_j^2 - V^2)^2 + 4W^2(\epsilon_j + V)^2 + 4W(\epsilon_j + V)(\epsilon_j^2 - V^2)}{(\epsilon_j^2 - V^2)^2 + \Delta^2(\epsilon_j - V)^2 + 4W^2(\epsilon_j + V)^2}.
 \end{aligned}
 \tag{11}$$

Обратим внимание на то, что в соответствии с (11) вероятности  $P_S^{(j)}$  являются симметричными функциями  $W$ , а вероятности  $P_{RR}^{(j)}$  и  $P_{LL}^{(j)}$  при смене знака  $W$  переходят друг в друга.

Зависимости (11) показаны на рис. 2. Видно, что двухчастичные вероятности для состояний, симметричных относительно перестановок частиц, претерпевают резкие изменения при переходе через точки антикроссинга  $W = V$  или  $W = 0$ , мало изменяясь в остальной области значений  $W$ . Следует также обратить внимание на корреляцию между поведением электронной плотности в квантовых точках (т.е. фактически двухчастичных вероятностей) и зависимостью энергий стационарных состояний от внешнего поля. Легко заметить, что значения матричного элемента  $W$ , соответствующие горизонтальным участкам (или асимптотически приближающимся к горизонтальным) на зависимости  $\epsilon_j(W)$ , всегда отвечают симметричному распределению заряда в квантовых точках. Напротив, те участки, на которых происходит монотонное и близкое к линейному изменение энергии при изменении электрического поля, соответствуют максимально несимметричному пространственному распределению электронной плотности. Смена "режимов" происходит в точках антикроссинга: при  $W = 0$  для второго и третьего возбужденных состояний и при  $W = \pm V$  для основного и второго возбужденного состояний.

Такая корреляция легко объяснима. Так, например, для основного состояния в области  $|W| < V$  электроны находятся в разных квантовых точках, и поэтому их потенциальные энергии во внешнем поле, имея разные знаки, компенсируют друг друга, что и отражает близкий к горизонтальному участок на кривой  $\epsilon_0(W)$  (рис. 1). Переход через точку антикроссинга  $W = V$  сопровождается

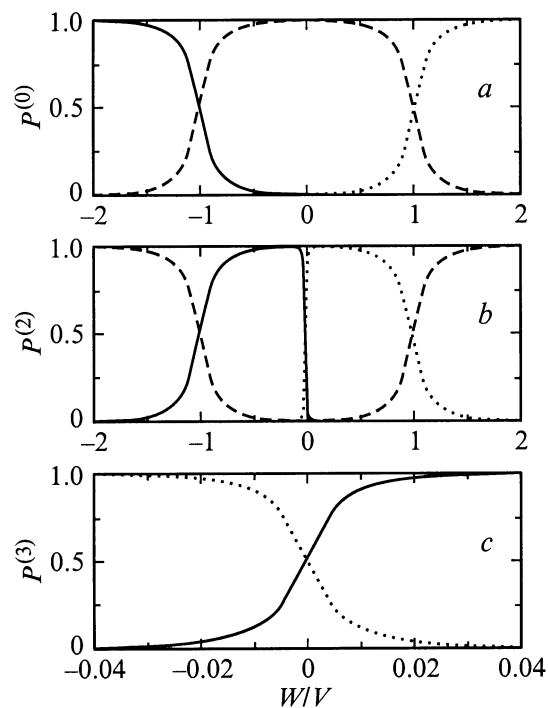


Рис. 2. Двухчастичные вероятности  $P^{(0)}$  (a),  $P^{(2)}$  (b) и  $P^{(3)}$  (c), рассчитанные по формулам (11):  $P_{RR}^{(j)}$  (сплошная кривая),  $P_{LL}^{(j)}$  (пунктир),  $P_S^{(j)}$  (штриховая кривая).  $\Delta/V = 0.25$ .

для основного состояния переводом обоих электронов в левую точку. При этом потенциальные энергии электронов во внешнем электрическом поле складываются, имея уже одинаковые знаки, вследствие чего энергия основного состояния изменяется пропорционально полю. Аналогичные рассуждения могут быть приведены и для остальных стационарных состояний.

Очевидно, что описанные закономерности в достаточной степени универсальны и не должны сильно зависеть от конкретной формы квантовых точек. Это подтверждается результатами работы [13], в которой были численно рассчитаны двухэлектронные спектры в несимметричной прямоугольной двойной квантовой точке, обладающие описанными выше характерными особенностями. В частности, на кривых зависимости энергии от приложенного напряжения четко видны изгибы, свидетельствующие о преодолении (или, напротив, установлении) кулоновской блокады.

Ясно, что потенциальная энергия электронов и, следовательно, значения матричных элементов будут существенным образом зависеть от диэлектрических поляризационных свойств материалов, составляющих как сами квантовые точки, так и среду, их окружающую. Обсудим два предельных случая: контакт двух материалов с близкими значениями диэлектрической проницаемости (например, двух близких по своим свойствам полупроводников) и контакт двух материалов с сильно различающимися диэлектрическими свойствами (например, полупроводника и диэлектрика).

## 2. Квантовые точки в полупроводнике

Рассмотрим вначале первый случай — контакт двух полупроводников. Значение диэлектрической проницаемости обоих материалов обозначим как  $\epsilon_s$  и будем считать ее постоянной по всему объему полупроводников, пренебрегая незначительными искажениями электрического поля вблизи границ квантовых точек.

Потенциальная энергия парного взаимодействия двух электронов в этом случае запишется в стандартном виде  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^2/\epsilon_s |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ , а потенциальная энергия каждого из электронов во внешнем электрическом поле, если уровень отсчета потенциальной энергии выбрать посередине между точками, будет описываться выражением  $V(\mathbf{r}) = e\mathbf{E}\mathbf{r} = eEz$  ( $-e$  — заряд электрона). Здесь буквой  $E$  обозначена проекция вектора напряженности электрического поля на ось  $z$  в самом полупроводнике.

Матричные элементы  $V_{ij}$  здесь легко вычисляются. При этом в силу симметрии задачи диагональные матричные элементы  $X$  тождественно обращаются в нуль, а недиагональные оказываются отличными от нуля:  $W = eEL$ . Значение  $W$ , как нетрудно заметить, соответствует потенциальной энергии электрона, находящегося в центре правой квантовой точки, в постоянном электрическом поле  $E$ .

Для матричных элементов парного взаимодействия  $V_{\text{int}}^{jm}$  получаем

$$\begin{aligned} U &= \frac{e^2}{\epsilon_s R} \left( 1 - \frac{\text{Si}(2\pi)}{2\pi} + \frac{\text{Si}(4\pi)}{4\pi} \right) \\ &+ \frac{e^2}{4\epsilon_s L} \approx \frac{0.893e^2}{\epsilon_s R} + \frac{e^2}{4\epsilon_s L}, \\ V &= \frac{e^2}{\epsilon_s R} \left( 1 - \frac{\text{Si}(2\pi)}{2\pi} + \frac{\text{Si}(4\pi)}{4\pi} \right) \\ &- \frac{e^2}{4\epsilon_s L} \approx \frac{0.893e^2}{\epsilon_s R} - \frac{e^2}{4\epsilon_s L}, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\text{Si}(x)$  — функция интегрального синуса аргумента  $x$ . Можно показать, что сумма  $U + V$  имеет смысл энергии взаимодействия объемных плотностей двух зарядов, находящихся в центре одной квантовой точки, а разность  $U - V$  можно интерпретировать как энергию взаимодействия электронов, находящихся в центрах разных квантовых точек.

Очевидно, что учет кулоновского отталкивания между электронами должен привести к увеличению энергии системы. В отсутствие взаимодействия энергии стационарных состояний равны (без внешнего поля):  $\hbar^2\pi^2/m - \Delta$  — для основного,  $\hbar^2\pi^2/m + \Delta$  — для третьего возбужденного,  $\hbar^2\pi^2/m$  — для первого и второго состояний. Следовательно, в соответствии с полученными формулами (3), (6) и (12) заключаем, что энергии основного и первого возбужденного состояний повышаются приблизительно (пренебрегая малой энергией перехода  $\Delta$ ) на  $e^2/2\epsilon_s L$ , а энергии второго и третьего состояний — на  $1.786e^2/\epsilon_s R$ . Вычисление двухчастичных вероятностей показало, что в основном и первом возбужденном состояниях электроны находятся в разных квантовых точках, а во втором и третьем возбужденных состояниях — в одной. Этим и объясняются полученные значения сдвига энергетических уровней вследствие кулоновского отталкивания.

Заметим, что условие  $|W| = V$ , задающее точки антикроссинга, которое теперь можно записать в форме

$$\frac{1.786e^2}{\epsilon_s R} - \frac{e^2}{2\epsilon_s L} = 2e|E|L, \quad (13)$$

представляет собой закон сохранения энергии: в левой части приведена разность энергий взаимодействия электронов, находящихся в одной и в разных квантовых точках, а в правой части — работа электрического поля по перемещению заряда из одной квантовой точки в другую. Соотношение (13) задает некое критическое значение напряженности электрического поля  $E$ , при котором кулоновская блокада может быть преодолена. При значениях, меньших критического, электрическое поле не может совершить требуемую работу по преодолению сил отталкивания, и электроны остаются в разных квантовых точках. Численные оценки показывают, что критическое значение напряженности электрического поля

может превышать  $10^5$  V/cm, что соответствует разности потенциалов между квантовыми точками в несколько десятков mV.

### 3. Квантовые точки в диэлектрике

Другой предельный случай — контакт двух материалов с сильно различающимися диэлектрическими проницаемостями, например полупроводника и диэлектрика. В этом случае зависимость  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  существенно отличается от обычного кулоновского закона, а  $V(\mathbf{r})$  уже не равно  $e\mathbf{E}\mathbf{r}$ , поскольку поля, создаваемые каждым из электронов, претерпевают сильные изменения по сравнению со случаем однородной среды.

Для того чтобы записать полную потенциальную энергию электронов, следует учесть еще и энергию взаимодействия каждого из электронов с полями изображений (поляризаационные поля). При этом энергия взаимодействия электрона с полем собственного изображения вносит вклад в функцию  $V(\mathbf{r})$ , а энергия взаимодействия с полем другого электрона — в  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Точные выражения для  $V(\mathbf{r})$  и  $V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  получить довольно сложно, поэтому далее мы будем использовать некоторые приближения.

В частности, будем пренебрегать тем влиянием, которое оказывают на электрон, находящийся в одной квантовой точке, поляризаационные поля, вызванные второй квантовой точкой. Кроме того, положим, что диэлектрическая проницаемость полупроводника  $\epsilon_s$  много больше диэлектрической проницаемости диэлектрика  $\epsilon_d$  (так, для кремния  $\epsilon_s \approx 12$ , а для двуокиси кремния  $\epsilon_d \approx 4$ ), что позволит нам в выражениях для потенциала электрического поля, которые традиционно записываются в виде разложений по полиномам Лежандра (см., например, [4]), пренебрегать неизотропными слагаемыми, сохраняя в рядах лишь нулевой член разложения.

Вообще говоря, первое условие может быть строго обосновано лишь в случае достаточно сильного удаления точек друг от друга, что в нашей задаче не имеет места. Расчеты, однако, показывают, что учет взаимного влияния квантовых точек ведет к поправкам, имеющим порядок  $(R/2L)^4$  по сравнению с оставленными слагаемыми в энергии межэлектронного взаимодействия и  $(R/2L)^3$  в потенциальной энергии электронов во внешнем электрическом поле. Поскольку отношение  $R/2L$  по крайней мере меньше  $1/2$ , эти поправки, скорее всего, не будут превышать 10%.

С учетом сделанных приближений можно получить, например, выражение для энергии взаимодействия заряда с полем собственного изображения в виде  $e^2/2\epsilon_d R$ . В случае если оба заряда находятся в одной квантовой точке, энергия их взаимодействия складывается из обычного кулоновского слагаемого  $e^2/\epsilon_s |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  и энергий взаимодействия каждого из электронов с полем изображения другого электрона, равных в сумме  $e^2/\epsilon_d R$ . Если же

заряды находятся в разных точках, общая энергия их взаимодействия может быть записана в виде  $e^2/2\epsilon_d L$ . В том же приближении потенциальная энергия электрона во внешнем электрическом поле равна  $eEL$  и  $-eEL$  для правой и левой квантовых точек соответственно. Таким образом, в случае  $\epsilon_d \ll \epsilon_s$  можно получить  $X = e^2/2\epsilon_d R$ ,  $W = eEL$ , где поле  $E$ , как и прежде, представляет собой напряженность электрического поля непосредственно в среде (в данном случае в диэлектрике). Матричный элемент  $X$  имеет смысл характерной энергии электрона во внешнем поле — поле его собственного изображения. В отличие от предыдущего случая однородной среды появление добавочной потенциальной энергии у электронов приводит к общему дополнительному сдвигу всех уровней энергии стационарных состояний на величину  $e^2/\epsilon_d R$ .

Для матричных элементов парного взаимодействия получаем

$$U = \frac{e^2}{2\epsilon_d} \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{2L} \right), \quad V = \frac{e^2}{2\epsilon_d} \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{2L} \right). \quad (14)$$

Как и в первом случае (однородной среды), комбинации матричных элементов  $U + V$  и  $U - V$  имеют смысл энергий взаимодействия электронов, находящихся соответственно в одной и в разных квантовых точках. Однако теперь наибольший вклад в эти энергии вносит взаимодействие электронов с поляризаационными полями друг друга, а не прямое кулоновское отталкивание.

Рассмотрим теперь условие преодоления кулоновской блокады туннелирования для электронов. Как было показано ранее, это происходит при равенстве значений матричных элементов  $W$  и  $V$ , которое, как и в случае контакта двух полупроводников с близкими свойствами, имеет смысл закона сохранения энергии при перемещении электрона из одной квантовой точки в другую. Из выражений (14) можно также получить значение критического поля

$$E^* = \frac{e}{2\epsilon_d L} \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{2L} \right),$$

достаточного для преодоления сил отталкивания. Численные значения напряженности критического электрического поля и соответствующей разности потенциалов в случае полупроводниковых квантовых точек в диэлектрике имеют тот же порядок величины, что и в случае контакта двух полупроводников с близкими поляризаационными свойствами.

Таким образом, в сравнительно слабых электрических полях,  $|E| < E^*$ , минимуму потенциальной энергии системы отвечает нахождение электронов в разных квантовых точках. Более сильное электрическое поле, превышающее значение  $E^*$ , порождает новую устойчивую двухэлектронную конфигурацию, отвечающую минимуму потенциальной энергии, — когда оба электрона располагаются в одной, левой или правой (в зависимости от направления вектора напряженности), квантовой точке.

Следовательно, путем изменения внешнего электрического поля можно регулировать заселенности квантовых точек, переводя электроны из одной точки в другую. Заметим, что переход по величине электрического поля от одной устойчивой конфигурации к другой осуществляется очень резко, на масштабах, примерно на порядок меньших самого значения  $E^*$ .

## Список литературы

- [1] M.A. Olshavsky, A.N. Goldstein, A.P. Alivisatos. *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 25, 9438 (1990).
- [2] Q. Ye, R. Tsu, E.H. Nicolian. *Phys. Rev.* **B44**, 4, 1806 (1991).
- [3] A.D. Andreev, A.A. Lipovskii. *Phys. Rev.* **B59**, 23, 15 402 (1999).
- [4] D. Babic, R. Tsu, R.F. Greene. *Phys. Rev.* **B45**, 24, 14 150 (1992).
- [5] J.-L. Zhu, Z.-Q. Li, J.-Z. Yu, K. Ohno, Y. Kawazoe. *Phys. Rev.* **B55**, 23, 15 819 (1997).
- [6] K. Kim. *Phys. Rev.* **B57**, 20, 13 072 (1998).
- [7] M. Lannoo, C. Delerue, G. Allan. *J. Lumin.* **70**, 170 (1996).
- [8] Д.И. Тетельбаум, О.Н. Горшков, С.А. Трушин и др. *Матер. Совещ. "Нанофотоника"*. Нижний Новгород (1999). С. 246.
- [9] Л.Е. Федичкин, М.В. Янченко, К.А. Валиев. *Тез. докл. 4-й рос. конф. по физике полупроводников. Новосибирск (1999)*. С. 233.
- [10] J.Q. You, H.-Z. Zheng. *Phys. Rev.* **B60**, 12, 8727 (1999).
- [11] H. Imamura, P.A. Maksym, H. Aoki. *Phys. Rev.* **B59**, 8, 5817 (1999).
- [12] S. Nagaraja, J.-P. Leburton, R.M. Martin. *Phys. Rev.* **B60**, 12, 8759 (1999).
- [13] G.W. Bryant. *Phys. Rev.* **B48**, 11, 8024 (1993).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика*. Наука, М. (1989). 768 с.
- [15] А.А. Галкин, О.М. Игнатьев. *Письма в ЖЭТФ* **9**, 12, 657 (1969).
- [16] И.О. Кулик, Р.И. Шехтер. *ЖЭТФ* **68**, 2, 623 (1975).
- [17] Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике*. Наука, М. (1974). 832 с.