

## «Шаровые» квантовые точки

© Н.Е. Капуткина, Ю.Е. Лозовик

Институт спектроскопии Российской академии наук,  
142092 Троицк, Московская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 31 марта 1998 г.  
В окончательной редакции 5 мая 1998 г.)

Рассмотрены квантовые точки с трехмерным удерживающим потенциалом — «шаровые» квантовые точки — с учетом межэлектронного взаимодействия (квантовый аналог атома Томсона). Численной диагонализацией полного гамильтониана на одночастичном базисе определен энергетический спектр двухэлектронных параболических квантовых точек.

В последнее время активно ведутся исследования квантовых точек как с двумерным [1–5], так и с трехмерным [6,7] удерживающим потенциалом. Квантовые точки могут рассматриваться как квантово-механический аналог гигантского атома Томсона (двумерного или же — для «шаровых» квантовых точек — трехмерного). Современная нанотехнология позволяет контролируемо изменять такие параметры, как вид и жесткость удерживающего потенциала, число частиц, характерные размеры области их локализации. Вид удерживающего потенциала определяется способом получения КТ. Наиболее часто используются модель жестких стенок и модель параболического удерживающего потенциала. Модель параболического латерального потенциала подтверждена самосогласованными расчетами [8] и применима для не слишком больших КТ.

В настоящей работе мы рассмотрим изолированную квантовую точку с трехмерным параболическим удерживающим потенциалом

$$U(r, \theta, \varphi) = \alpha r^2,$$

где  $\alpha$  — параметр крутизны удерживающего потенциала,  $r, \theta, \varphi$  — сферические координаты от центра квантовой точки.

Перейдем к безразмерным величинам, вводя следующие единицы расстояния, энергии, параметра крутизны удерживающего потенциала соответственно:

$$a_0 = \hbar^2 \varepsilon / (2m^* e^2), \quad E_0 = 2m^* e^4 / (\hbar^2 \varepsilon^2), \quad \alpha_0 = E_0 / a_0^2, \quad (2)$$

где  $m^*$  — эффективная электронная масса,  $\varepsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $a_0$  и  $E_0$  — радиус и энергия связи двумерного экситона.

Одноэлектронный энергетический спектр в параболической яме определяется зависимостью

$$E_{nl} = \sqrt{\alpha} (4n + 2l + 3), \quad (3)$$

где  $n$  — радиальное квантовое число ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ),  $l$  — орбитальное квантовое число ( $l = 0, 1, \dots$ ).

Соответствующая ортонормированная система одночастичных функций имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_{nlm} = & \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2l+1(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) \\ & \times \sqrt{\frac{2\alpha^{\frac{l+1+1/2}{2}} n!}{\Gamma(n+l+1/2)}} \exp(-\sqrt{\alpha} r^2 / 2) \\ & \times r^l L_n^{l+1/2}(\sqrt{\alpha} r^2), \end{aligned} \quad (4)$$

где  $P_l^m(x)$  — присоединенные функции Лежандра первого рода,  $r, \varphi, \theta$  — сферические координаты.

Рассмотрим двухэлектронную квантовую точку с трехмерным параболическим латеральным потенциалом вида (1).

Вводя координаты  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1$  и полагая  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi_r(\mathbf{r})\psi_R(\mathbf{R})$ , получим систему уравнений

$$\left[ \Delta_{\mathbf{R}} + \left( E_R - \frac{\alpha}{2} R^2 \right) \right] \psi_R = 0, \quad (5)$$

$$\left[ \Delta_{\mathbf{r}} + \left( E_r - \frac{\alpha}{2} r^2 + \frac{1}{|r|} \right) \right] \psi_r = 0, \quad (6)$$

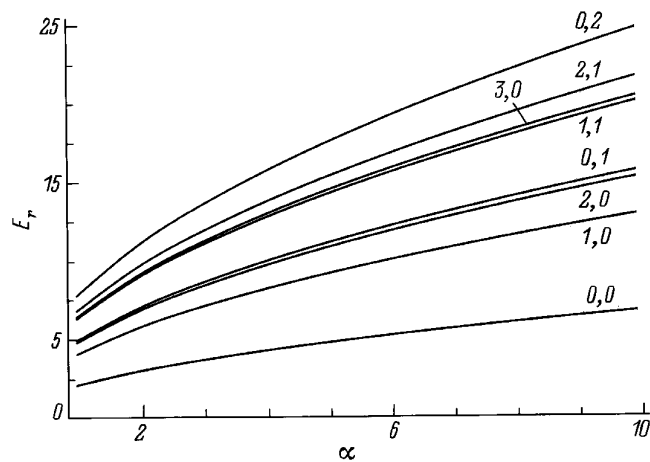
$$E = E_R + E_r. \quad (7)$$

Уравнение (5), описывающее движение центра тяжести, решается точно (это имеет место и для произвольного числа электронов в параболической яме, см., например, [9]). Его решения имеют вид (3), (4) с заменой  $\alpha$  на  $\alpha' = \alpha/2$ .

Для решения уравнения (6) разложим  $\psi_r$  по собственным функциям одноэлектронной квантовой точки

$$\psi_r = \sum_{nlm} C_{nlm} \psi_{nlm}. \quad (8)$$

Энергетический спектр двухэлектронной квантовой точки с трехмерным удерживающим потенциалом опре-



Зависимость нижних уровней энергии  $E_r$  от параметра крутизны удерживающего потенциала  $\alpha$  для двухэлектронных шаровых квантовых точек с трехмерным удерживающим потенциалом. Пары чисел у кривых — значения  $l, n$ .

деляется из уравнения

$$\det \left\{ V_{m_1 l m} + \delta_{n, n_2} (E_{nlm} - E_r) \right\} = 0 \quad (9)$$

( $l, m$  заданы), где матричный элемент кулоновского взаимодействия есть

$$V_{m_1 l m} = \left( \frac{n! n_1!}{\Gamma(n+l+1+\frac{1}{2}) \Gamma(n_1+l+1+\frac{1}{2})} \right)^{1/2} \alpha \\ \times \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^{n_1} \frac{(-1)^{i+j}}{i! j!} \binom{n+l+1/2}{n-i} \binom{n_1+l+1/2}{n_1-j} \\ \times \Gamma\left(i+j+l+\frac{1}{2}\right),$$

где  $\Gamma$  — гамма-функция Эйлера.

Уравнение (9) решается численно. Поскольку  $V_{m_1 l m}, E_{nlm}$  не зависят от  $m$ , вырождение по  $m$  не снимается (спин мы не учитываем). Вырождение по  $n$  и  $l$  снимается.

Графики зависимостей нижних уровней энергетического спектра относительного движения электронов  $E_r$  от  $\alpha$  приведены на рисунке. Значения энергетических уровней монотонно возрастают с ростом  $\alpha$ . Расщепление уровней с разными наборами квантовых чисел ( $n, l$ ) и ( $n', l'$ ), таких что  $n - n' = 2(l' - l)$ , — результат кулоновского взаимодействия электронов (соответствующие одночастичные уровни совпадают). Это расщепление видно из рисунка для уровней ( $n = 0, l = 2$ ) и ( $n = 1, l = 2$ ); для уровней ( $n = 0, l = 3$ ) и ( $n = 1, l = 1$ ). С ростом  $\alpha$  величина расщепления монотонно возрастает. Когда  $\alpha$  достаточно велика, межэлектронное взаимодействие мало по сравнению с расстояниями между уровнями одноэлектронной задачи. В этом случае энергии относительного движения  $E_r$  асимптотически

стремятся к энергии  $E_R$  (3), т.е. линейны по  $\sqrt{\alpha}$ . Это видно из рисунка. Уровни  $E_{nl}$  для трехмерной задачи лежат выше, чем для двумерной [10].

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, ИНТАС и ISSEP.

## Список литературы

- [1] Ch. Sikorsky, U. Merkt. Phys. Rev. Lett. **62**, 18, 2164 (1989).
- [2] C.T. Lin, K. Nakamura, D.C. Tsui, K. Ismail, D.A. Antoniadis, H.I. Smith. Appl. Phys. Lett. **55**, 2, 168 (1989).
- [3] F. Geerinckx, F.M. Peeters, J.T. Devreese. J. Appl. Phys. **68**, 7, 3435 (1990).
- [4] D.A. Broido, K. Kempa, P. Bakshi. Phys. Rev. **B42**, 17, 11 400 (1990).
- [5] J. Weis, R.J. Haug, K. v. Klitching, K. Ploog. In: Quantum Dynamics of Submicron Structures / Ed. H.A. Cerderia, B. Kramer, G. Schon. Kluwer Academic Publishers, Netherlands (1995).
- [6] S. Schmitt-Rink, D.S. Chemla, D.A. Miller. Adv. Phys. **38**, 1, 89 (1989).
- [7] Y.Z. Hu, M. Lindberg, S.W. Koch. Phys. Rev. **B42**, 3, 1713 (1990).
- [8] A. Kumar, S.E. Laux, F. Stern. Phys. Rev. **B42**, 8, 5166 (1990).
- [9] Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam. Phys. Lett. **A145**, 5, 269 (1990).
- [10] Ya.M. Blanter, N.E. Kaputkina, Yu.E. Lozovik. Phys. Scripta **54**, 6, 539 (1996).