

Монография посвящена исследованию механизма формирования наноструктур в конденсированных средах. В механизме формирования наноструктур рассмотрена неоднородность среды. С учетом неоднородности среды введен заряд изображения, также определен потенциал удержания электронов в наноструктурах. Управление движением электронов в наноструктурах, в частности квантовых точках, квантовых ямах и квантовых проволоках, описано спин-орбитальным взаимодействием. Предназначается для студентов старших курсов, магистрантов и докторантов, специализирующихся в области нанотехнологии.

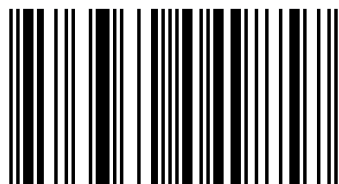


Жанар Калкозова

Механизм формирования наноструктур в конденсированных средах



Калкозова Жанар Каниевна, кандидат физико-математических наук.



978-3-330-04985-7

 **L A M B E R T**
Academic Publishing

Жанар Калкозова

**Механизм формирования наноструктур в конденсированных
средах**

Жанар Калкозова

**Механизм формирования
наноструктур в конденсированных
средах**

LAP LAMBERT Academic Publishing

Impressum / Выходные данные

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek: Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Alle in diesem Buch genannten Marken und Produktnamen unterliegen warenzeichen-, marken- oder patentrechtlichem Schutz bzw. sind Warenzeichen oder eingetragene Warenzeichen der jeweiligen Inhaber. Die Wiedergabe von Marken, Produktnamen, Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen u.s.w. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutzgesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Библиографическая информация, изданная Немецкой Национальной Библиотекой. Немецкая Национальная Библиотека включает данную публикацию в Немецкий Книжный Каталог; с подробными библиографическими данными можно ознакомиться в Интернете по адресу <http://dnb.d-nb.de>.

Любые названия марок и брендов, упомянутые в этой книге, принадлежат торговой марке, бренду или запатентованы и являются брендами соответствующих правообладателей. Использование названий брендов, названий товаров, торговых марок, описаний товаров, общих имён, и т.д. даже без точного упоминания в этой работе не является основанием того, что данные названия можно считать незарегистрированными под каким-либо брендом и не защищены законом о брендах и их можно использовать всем без ограничений.

Coverbild / Изображение на обложке предоставлено: www.ingimage.com

Verlag / Издатель:

LAP LAMBERT Academic Publishing

ist ein Imprint der / является торговой маркой

OmniScriptum GmbH & Co. KG

Bahnhofstraße 28, 66111 Saarbrücken, Deutschland / Германия

Email / электронная почта: info@omniscryptum.com

Herstellung: siehe letzte Seite /

Напечатано: см. последнюю страницу

ISBN: 978-3-330-04985-7

Zugl. / Утверд.: Алматы, Казахский Национальный Университет им. аль-Фараби, 2010 год

Copyright © Жанар Калкозова

Copyright © 2017 OmniScriptum GmbH & Co. KG

Alle Rechte vorbehalten. / Все права защищены. Saarbrücken 2017

КАЛКОЗОВА ЖАНАР КАНИЕВНА

Механизм формирования наноструктур в конденсированных средах

Исследование механизма формирования наноструктур в конденсированных средах

КАЛКОЗОВА ЖАНАР КАНИЕВНА

Кафедра физики твердого тела и нелинейной физики

Монография посвящена исследованию механизма формирования наноструктур в конденсированных средах. В механизме формирования наноструктур рассмотрена неоднородность среды. С учетом неоднородности среды введен заряд изображения, также определен потенциал удержания электронов в наноструктурах. Управление движением электронов в наноструктурах, в частности квантовых точках, квантовых ямах и квантовых проволоках, описано спин-орбитальным взаимодействием. Предназначается для студентов старших курсов, магистрантов и докторантов, специализирующихся в области нанотехнологии.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА 1 ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР	7
1.1 Формирования наноструктурных материалов	7
1.2 Свойства полупроводниковых гетероструктур	8
1.3 Влияние размера зёрен и границ раздела на свойства наноматериалов	12
ГЛАВА 2 ГАМИЛЬТОНИАН ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ	15
2.1 Постановка задачи	15
2.2 Гамильтониан взаимодействия системы	17
2.3 Гамильтониан взаимодействия двухмерной системы во внешнем магнитном поле	26
2.4 Краткие выводы	29
ГЛАВА 3 ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМА ФОРМИРОВАНИЯ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ В ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ	30
3.1 Постановка задачи	30
3.2 Определение энергетического терма внутренней системы	32
3.3 Определение энергетического спектра двухэлектронной квантовой точки с параболическим потенциалом	42
3.4 Краткие выводы	50
ГЛАВА 4 ДИПОЛЬНОЕ И СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ	51
4.1 Постановка задачи	51
4.2 Определение энергетического спектра с учетом дипольного взаимодействия	52
4.3 Спин – орбитальное взаимодействие двух электронов в квантовой точке	56
4.4 Краткие выводы	68
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	69
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	71
ПРИЛОЖЕНИЕ А Представление канонических переменных в нормальной форме	78
ПРИЛОЖЕНИЕ В Некоторые детали вычисления для различных потенциалов	82

ПРЕДИСЛОВИЕ

Данная монография была написана на основе кандидатской диссертации на тему «Исследование механизма формирования наноструктур в конденсированных средах». Кандидатская диссертация была выполнена на базе «Кафедры физики твердого тела и нелинейной физики» «Физико-технического факультета» Казахского национального университета имени аль-Фараби (КазНУ им. Аль-Фараби).

В рамках выполнения данной исследовательской работы определен потенциал запирающих электронов в наноструктурах, исходя из предположения о существовании заряда изображений, который обусловлен большой разностью диэлектрических проницаемостей слоев. Показаны условия перехода кулоновского потенциала к потенциалу параболического конфайнмента. Определен потенциал параболического конфайнмента с учетом ангармонических поправок. Определен механизм управления движением электронов в квантовой точке. Установлено, при каких условиях зарядовое взаимодействие электронов заменяется спиновым взаимодействием. Аналитически определена константа связи спин–орбитального взаимодействия электронов в наноструктурах. Показана зависимость константы спин–орбитального взаимодействия от зарядов изображений и от расстояния между электронами. Возможность контролировать и управлять свойствами квантовых точек привлекает к ним огромный интерес, так как они могут быть использованы, например, в качестве новой элементной базы для наноэлектроники.

Калкозова Ж.К.

ВВЕДЕНИЕ

В конце декабря 1959 года физик теоретик Р. Фейнман, выступая с лекцией на рождественском обеде в Калифорнийском технологическом институте, обратил внимание на проблему контроля и управления строением вещества в интервале очень малых размеров как на малоизученную, но очень перспективную область физики [1, 2] и науки в целом. В частности, он отметил, что «научившись регулировать и контролировать структуры на атомном уровне, мы получим материалы с совершенно неожиданными свойствами и обнаружим совершенно необычные эффекты. ...Развитие техники манипуляции на атомарном уровне позволит решить многие проблемы...».

Технику манипуляции на атомарном уровне сейчас называют нанотехнологией. Термин «нанотехнология» впервые был введен японским профессором Норио Танигучи в его докладе «Основные принципы нанотехнологии» на международной конференции "International Conference on Precision Engineering", в Токио в 1974 году [3]. Первоначально слово "нанотехнология" означало комплекс процессов, обеспечивающих высокоточную обработку поверхности с использованием сверхтонкого травления, нанесения плёнок, высокоэнергетических электронных, фотонных и ионных пучков. Различные методы нанотехнологии получили наибольшее развитие и применение в микроэлектронике.

Когда речь идёт о развитии нанотехнологии, имеются в виду три основных направления: изготовление электронных схем (в том числе и объёмных) с активными элементами, размеры которых сравнимы с размерами молекул и атомов; непосредственная манипуляция атомами и молекулами и сборка из них новых материалов, конструкций, устройств; разработка и изготовление наномашин. Сегодня обычный процесс изготовления интегральных микросхем включает такие технологические этапы, как литография, ионная имплантация, диффузия и окисление, осаждение, травление, очистка, планаризация и измерения. Важнейшие научные и инженерные разработки направлены на усовершенствование литографии, поскольку именно здесь уже в обозримом будущем может быть достигнут предел технологических возможностей. Большие практические успехи достигнуты в такой тонкоплёночной технологии как молекулярно-лучевая и газофазная эпитаксия.

Использование наноструктур для создания принципиально новых электронных устройств относится к быстро развивающейся в последние десятилетия области физики, которая получила название наноэлектроника. Современный научно-технический прогресс в значительной степени определяется развитием электроники, основой которой являются успехи фундаментальных наук, в первую очередь физики твёрдого тела и физики полупроводников. Последние достижения в этих областях связаны с физикой низкоразмерных структур и с созданием технологий получения наноструктур с принципиально новыми функциональными возможностями для нано- и оптоэлектроники, средств связи, новых информационных технологий,

измерительной техники. Достижения в разработке и изготовлении наноструктур различного назначения определяются уровнем развития нанотехнологий, который позволяет с атомной точностью получать наноструктуры с необходимым химическим составом и конфигурацией, а также методами комплексной диагностики наноструктур, включая контроль в процессе изготовления и управление на этой основе технологическими процессами. Поэтому усилился интерес к исследованию полупроводниковых наноструктур и к их использованию для создания квазидвумерных и квазиульмерных структур. Для описания или понимания динамики наноструктуры как квантовые «точки» и квантовые «провода», существенную роль могут играть квантово-механические эффекты. Это связано с тем, что такой объект может состоять из конечного числа электронов и имеет маленькие размеры.

Поэтому исследования низкоразмерных малочастичных электронных систем, которые образованы в наноструктурах, представляют большой интерес, как с фундаментальной точки зрения, так и с точки зрения использования их для создания нового поколения современных приборов.

Принимая за основу вышесказанное, исследования механизма формирования наноструктур в конденсированных средах представляются актуальными и результаты исследования по данной теме имеют важные фундаментальные и практические приложения.

ГЛАВА 1 ЗАКОНОМЕРНОСТИ И МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР

1.1 Формирования наноструктурных материалов

К наноструктурным материалам относят объекты с характерным структурным размером менее 100 нм. Малый размер зерна приводит к появлению уникальных физических, химических, механических и др. свойств, что привлекает внимание широкого круга специалистов в области материаловедения, физики и химии твердого тела, биологии и перспективных технологий.

При плавном уменьшении размеров образца от больших значений, например метра или сантиметра, до очень маленьких свойства сначала остаются низменными, затем начинают медленно меняться, а при размерах менее 100 нм могут измениться радикально. Если размеры образца в одном измерении лежат в нанометровом диапазоне, а в двух других остаются большими, то получившаяся структура называется квантовой ямой. Если образец мал в двух измерениях и имеет большие размеры в третьем, то такой объект называют квантовой проволокой. Предельный случай этого процесса уменьшения размеров, при котором размеры во всех трех измерениях лежат в нижней части нанометрового диапазона, называется квантовой точкой. Эпитет «квантовый» в названиях этих трех типов наноструктур используют потому, что в области ультрамалых масштабов возникает изменение свойств квантово – механической природы.

Способы получения полупроводниковых квантовых точек весьма различны: они могут создаваться из планарных полупроводниковых гетероструктур с помощью литографии, могут получаться химическими методами.

В последние десятилетия интерес к методам получения сверхмелкозернистых объемных и дисперсных материалов существенно вырос, так как обнаружилось, что уменьшение размера структурных элементов ниже некоторой пороговой величины может приводить к заметному изменению свойств [16-28]. Такие эффекты появляются, когда средний размер кристаллических зёрен не превышает 100 нм, и наиболее отчётливо наблюдаются, когда размер зёрен - менее 10 нм. Таким образом, нанотехнология и науки о наноструктурах и наноматериалах имеют дело с объектами конденсированного вещества размером от 1 до 100 нм.

Наноматериалы можно классифицировать также по геометрической форме и размерности структурных элементов, из которых они состоят. Основными типами нанокристаллических материалов по размерности являются кластерные материалы, волоконные материалы, плёнки и многослойные материалы, а также поликристаллические материалы, зёрна которых имеют сравнимые размеры во всех трёх направлениях.

Переход от свойств изолированных наночастиц к свойствам объёмных кристаллических веществ в течение многих десятилетий оставался белым пятном, так как отсутствовало промежуточное звено – компактное твёрдое тело с зёрнами нанометрового размера. Лишь после 1985 года, когда были созданы методы получения компактных нанокристаллических веществ [29], началось интенсивное заполнение отмеченного пробела в знаниях о твёрдом теле. Однако вопрос о том, как быстро нарастает и на каком этапе объединения атомов завершается формирование того или иного свойства массивного кристалла, до сих пор не решён. Не вполне ясно, каковы и как могут быть разделены вклады поверхностных (связанных с границами раздела) и объёмных (связанных с размером частиц) эффектов в свойства наноматериалов.

После обнаружения в 1984-1985 гг. новой аллотропной модификации углерода – сферических фуллеренов C_{60} и C_{70} [30, 31], возник вопрос о получении других топологических форм углеродных наночастиц. В качестве одной из возможных форм углеродных наночастиц была предложена, в частности, квазиодномерная трубчатая структура [32], которую стали называть нанотрубкой. Нанотрубки образуются в результате свертывания базисных плоскостей (0001) гексагональной решётки графита и могут быть однослойными и многослойными.

Действительно, в 1991 и последующих годах XX века удалось экспериментально обнаружить квазиодномерные трубчатые структуры углерода – углеродные нанотрубки [33-37].

После открытия углеродных нанотрубок на свет появился еще один принципиально новый класс наноматериалов — сверхтонкие углеродные пленки. Их первооткрыватели Андре Гейм и Константин Новоселов назвали эти особые пленки графеновыми, а составляющий их материал - графеном [38]. Графен, слой атомов углерода, соединенных в гексагональную кристаллическую решетку, по большому счету можно считать двумерной копией трехмерного графита. Его можно представить как одну плоскость графита, отделенную от объемного кристалла, т.е. графеновые пленки - это раскатанные в одной плоскости миллионы углеродных нанотрубок, сцепленных друг с другом на очень большом «листе» атомарной толщины. Ученые полагают, что однослойные углеродные нанотрубки - только первая ступень в развитии нанoeлектроники, а конечная - почти наверняка будет базироваться на графене.

1.2 Свойства полупроводниковых гетероструктур

Для электроники особый интерес представляют полупроводниковые гетероструктуры, изготовленные из двух или более различных материалов. В этих гетероструктурах важная роль принадлежит переходному слою, т.е. границе раздела двух материалов. Более того, согласно [39] в полупроводниковых гетероструктурах техническим устройством является сама граница раздела. Все элементы, входящие в состав материалов, из которых делают полупроводниковые гетероструктуры (Zn, Cd, Hg, Al, Ga, In, Si, Ge, P, As, Sb, S, Se, Te), расположены в центральной части периодической таблицы

элементов и принадлежат к II—VI группам. В середине расположен кремний, который в технологии электронных материалов занимает такое же важное место, как сталь в производстве конструкционных материалов. Помимо кремния электроника имеет дело с полупроводниковыми соединениями $A^{III}B^V$ и их твёрдыми растворами, а также с соединениями $A^{II}B^{VI}$. Из соединений типа $A^{III}B^V$ наиболее часто используется арсенид галлия GaAs, из твёрдых растворов — $Al_xCa_{1-x}As$. Именно при изучении гетероструктур чаще всего используют твёрдые растворы системы AlAs-GaAs, поскольку арсениды алюминия и галлия имеют почти одинаковые параметры решётки. В этом случае GaAs в виде монокристаллов является идеальной подложкой для роста гетероструктур. Другой естественной подложкой является фосфид индия InP, который применяется в комбинации с твёрдыми растворами GaAs-InAs, AlAs-AlSb и другими.

Прорыв в создании тонкослойных гетероструктур произошёл с появлением практической технологии роста тонких слоев методами молекулярно-лучевой эпитаксии [40], газофазной эпитаксии из металлоорганических соединений и жидкофазной эпитаксии. По методике молекулярно-лучевой эпитаксии выращивание пленок или более сложных структур производится в высоковакуумной установке путем осаждения атомов (или молекул) испаряемого вещества, содержащегося в специальном источнике, на поддерживаемую при заданной температуре подложку. Потоки вещества из источников столь малы, что при определенных условиях на поверхности нарастает один мономолекулярный слой вещества за другим: осаждающиеся на поверхность атомы (молекулы) не остаются там, куда попали, а мигрируют по поверхности, встраиваясь в «подходящие места», что и обеспечивает высокое кристаллическое совершенство получаемых пленок и структур. Однако на свойства получающихся структур влияет множество факторов (температура подложки, интенсивность молекулярных пучков, свойства осаждаемых материалов, кристаллическое совершенство подложки и т.д.) и априори поэтому предсказать, что получится в данном конкретном случае, к сожалению, невозможно. По тому очень большое значение имеет поиск оптимальных для той или иной задачи режимов роста.

Появилась возможность выращивать гетероструктуры с очень резкой границей раздела. Это означало, что две гетерограницы можно расположить настолько близко друг к другу, что в этом промежутке определяющую роль будут играть размерные квантовые эффекты. Структуры подобного типа называют квантовыми ямами, реже — квантовыми стенками. В квантовых ямах средний узкозонный слой имеет толщину несколько десятков нанометров, что приводит к расщеплению электронных уровней вследствие эффекта размерного квантования. Проявление эффекта размерного квантования в виде характерной ступенчатой структуры оптических спектров поглощения полупроводниковой гетероструктуры GaAs-AlGaAs со сверхтонким слоем GaAs (квантовой ямой) впервые наблюдали авторы [41]; они обнаружили также сдвиг характеристических энергий при уменьшении толщины квантовой ямы (слоя GaAs). Гетероструктуры, в особенности двойные, включая квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки, позволяют управлять такими

фундаментальными параметрами полупроводниковых кристаллов, как ширина запрещённой зоны, эффективные массы и подвижности носителей заряда, электронный энергетический спектр.

Квантовые ямы и точки, получаемые методами литографии и молекулярно-лучевой эпитаксии, имеют размер от 5 до 100 нм.

Квантовые точки, т.е. наногетероструктуры с пространственным ограничением носителей заряда во всех трёх измерениях, реализуют предельный случай размерного квантования в полупроводниках, когда модификация электронных свойств материала наиболее выражена [43].

Электронный спектр идеальной квантовой точки (смотрите рисунок 1) представляет собой набор дискретных уровней, разделённых областями запрещённых состояний, и соответствует электронному спектру одиночного атома. Согласно [43] минимальный размер квантовых точек для системы InAs-AlGaAs составляет 4 нм, а максимальный размер не должен превышать 20 нм.

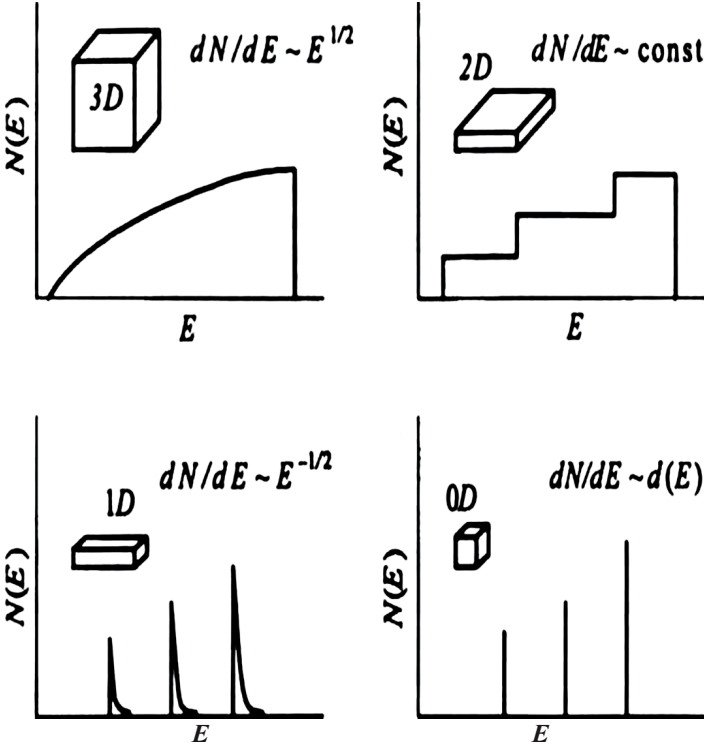


Рисунок 1 - Плотность состояний $N(R)$ для носителей заряда как функция размерности полупроводника:

(3D) трёхмерный полупроводник, (2D) квантовая яма, (1D) квантовая проволока, (0D) квантовая точка [43]

Долгое время попытки изготовления приборов на основе квантовых точек путём селективного травления структур с квантовыми ямами, роста на профилированных подложках или сколах были неудачны. Приборно-ориентированные структуры не были созданы, не была также продемонстрирована в явном виде принципиальная возможность реализации атомоподобного спектра плотности состояний в макроскопической полупроводниковой структуре. Качественный прорыв и реальные успехи в этой области связаны с использованием эффектов самоорганизации полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных полупроводниковых системах, благодаря чему удалось получить идеальные гетероструктуры с кристаллически совершенными квантовыми точками и высокой однородностью по размерам [43]. На этих структурах были продемонстрированы уникальные физические свойства идеальных квантовых точек и созданы первые оптоэлектронные приборы, в частности, инжекционные лазеры на квантовых точках.

Спонтанное возникновение периодически упорядоченных наноструктур на поверхности и в эпитаксиальных плёнках полупроводников является одним из проявлений самоорганизации в конденсированных средах. Упорядоченные наноструктуры могут возникать при отжиге образцов или же в процессе роста кристаллов. Согласно [43], все спонтанно упорядоченные наноструктуры можно разделить на четыре класса: структуры с периодической модуляцией состава в эпитаксиальных плёнках твёрдых растворах полупроводников; периодически фасетированные поверхности; периодические структуры плоских доменов (например, островков монослойной высоты); упорядоченные массивы трёхмерных когерентно напряжённых островков в гетероэпитаксиальных системах. Во всех упорядоченных наноструктурах соседние домены различаются постоянной кристаллической решётки и структурой поверхности, поэтому границы доменов являются источниками дальнедействующих полей упругих напряжений.

Спонтанное образование структур с модулированным составом в твёрдых растворах связано с неустойчивостью однородного твёрдого раствора относительно спинодального распада, так как свободная энергия твёрдого раствора с неоднородным составом меньше свободной энергии однородного твёрдого раствора. Конечным состоянием распадающегося твёрдого раствора является одномерная слоистая структура концентрационных упругих доменов, чередующихся вдоль одного из направлений наиболее легкого сжатия [43].

Применение квантовых точек как активной среды в различных электронных приборах с гетероструктурами (например, в диодных лазерах) обеспечивает лучшие свойства по сравнению с аналогичными приборами на квантовых ямах [44, 45]. В настоящее время полупроводниковые наногетероструктуры получают в основном методами молекулярно-лучевой и

газофазной эпитаксии, причём объёмы производства по той и другой технологии примерно одинаковы.

Использование наноструктур в электронике приведёт к дальнейшей миниатюризации электронных устройств с выходом на наноразмерные элементы для создания процессоров нового поколения.

1.3 Влияние размера зёрен и границ раздела на свойства наноматериалов

Малый размер зёрен обуславливает большую развитость и протяжённость межзёренных границ раздела, которые при размере зерна от 100 до 10 нм содержат от 10 до 50% атомов нанокристаллического твёрдого тела. Кроме того, сами зёрна могут иметь различные атомные дефекты — например, вакансии или их комплексы, количество и распределение которых качественно иное, чем в крупных зёрнах размером 5-10 мкм и более. Наконец, если размеры твёрдого тела по одному, двум или трём направлениям соизмеримы с некоторыми характерными физическими параметрами, имеющими размерность длины (размер магнитных доменов, длина свободного пробега электрона, дебройлевская длина волны и т.д.), то в соответствующих свойствах будут наблюдаться размерные эффекты. Например, диаметр экситона в полупроводниках составляет от десятков до сотен нанометров, расстояние между стенками доменов в магнитных материалах доходит до нескольких сотен нанометров. Это открывает возможность перехода к новому поколению материалов, свойства которых меняются с помощью регулирования размеров и формы составляющих их структурных элементов (частиц, зёрен, кристаллитов). Таким образом, в самом широком смысле слова под размерными эффектами следует понимать комплекс явлений, связанных с изменением свойств вещества вследствие

- 1) непосредственного изменения размера частиц,
- 2) вклада границ раздела в свойства системы,
- 3) соизмеримости размера частиц с физическими параметрами, имеющими размерность длины [46, 47, 48, 49].

Благодаря отмеченным особенностям строения, нанокристаллические материалы по свойствам существенно отличаются от обычных поликристаллов. По этой причине в настоящее время уменьшение размера зёрен рассматривается как эффективный метод изменения свойств твёрдого тела. Действительно, имеются сведения о влиянии наносостояния на магнитные свойства ферромагнетиков (температуру Кюри, коэрцитивную силу, намагничённость насыщения) и магнитную восприимчивость слабых пара- и диамагнетиков, о появлении эффектов памяти на упругих свойствах металлов и существенном изменении их теплоёмкости и твёрдости, об изменении оптических и люминесцентных характеристик полупроводников, о появлении пластичности боридных, карбидных, нитридных и оксидных материалов, которые в обычном крупнозернистом состоянии являются достаточно хрупкими. Сочетание в нанокристаллических материалах высокой твёрдости с пластичностью обычно объясняют затруднениями в активации источников

дислокаций из-за малых размеров кристаллитов, с одной стороны, и наличием зернограничной диффузионной ползучести, с другой стороны [50]. Наноматериалы отличаются исключительно высокой диффузионной подвижностью атомов по границам зёрен, на 5-6 порядков превосходящей таковую в обычных поликристаллах, однако механизмы диффузионных процессов в нанокристаллических веществах поняты далеко не полностью, и в литературе по этому поводу имеются противоположные объяснения. До сих пор остаётся дискуссионным вопрос о микроструктуре нанокристаллов, т. е. о строении границ раздела и их атомной плотности, о влиянии нанопор и других свободных объёмов на свойства нанокристаллов.

Обычно, когда речь идёт о неравновесном метастабильном состоянии, предполагается, что в соответствие ему можно поставить некоторое реально существующее равновесное состояние, например: метастабильному стеклообразному (аморфному) состоянию соответствует равновесное жидкое состояние (расплав). Особенность нанокристаллического состояния по сравнению с другими известными неравновесными метастабильными состояниями вещества заключается в отсутствии соответствующего ему по структуре и развитости границ равновесного состояния.

Нанокристаллические материалы представляют собой особое состояние конденсированного вещества — макроскопические ансамбли ультрамалых частиц с размерами до нескольких нанометров. Необычные свойства этих материалов обусловлены как особенностями отдельных частиц (кристаллитов), так и их коллективным поведением, зависящим от характера взаимодействия между наночастицами.

Главный вопрос при изучении нанокристаллического состояния — это вопрос о том, существует ли резкая, отчётливая граница между состоянием массивного вещества и нанокристаллическим состоянием, есть ли некоторый критический размер зерна или частицы, ниже которого проявляются свойства, характерные для нанокристалла, а выше — для массивного (объёмного) вещества? Иначе говоря, является ли с точки зрения термодинамики переход от массивного вещества к нанокристаллическому фазовым переходом первого рода? Ответ на этот вопрос важен для методически правильной постановки экспериментальных исследований наносостояния, для правильного понимания полученных результатов.

На первый взгляд переход к нанокристаллическому состоянию не является фазовым переходом, так как размерные эффекты на всех свойствах проявляются постепенно и постепенно нарастают по мере уменьшения размера изолированных наночастиц или размера зёрен в компактных наноматериалах. Однако все без исключения экспериментальные исследования выполнены на материалах со значительной дисперсией размеров частиц или зёрен и вполне естественно предположить, что дисперсия размеров размывает фазовый переход, если таковой имеется. Доказательным мог бы быть эксперимент по выявлению размерного эффекта, проведённый на серии материалов одинакового химического, но разного гранулометрического состава, причём каждый из этих материалов должен состоять из частиц или зёрен только одного

размера. Лишь в таком эксперименте можно полностью исключить влияние дисперсии размера частиц и определить, является ли размерная зависимость того или иного свойства непрерывной и гладкой или же она имеет скачки, изломы и другие особенности. К сожалению, на сегодняшний день такой эксперимент осуществить реально невозможно.

В механике сплошных сред успешно развивается рассмотрение нанокристаллического твёрдого тела как ансамбля взаимодействующих зернограничных дефектов. Этот подход наиболее полезен при изучении компактных наноматериалов. Например, для анализа симметричных свойств поликристаллов при изменении характерных масштабов структурной гетерогенности, т. е. размеров зёрен, в [51] используется теория калибровочных полей [52, 53], развитая для описания структурных и физических свойств материалов с дефектами. Согласно [51], при уменьшении размеров зёрен наблюдается топологический переход от уединённых волн ориентационно - сдвиговой неустойчивости, характерных для обычного поликристаллического состояния, к пространственно-периодическим структурам дефектов, формирование которых непосредственно обуславливает переход в нанокристаллическое состояние. Такой топологический переход в ансамбле зернограничных дефектов сопровождается резким изменением характеристик связности и показателей скейлинга.

ГЛАВА 2 ГАМИЛЬТОНИАН ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

2.1 Постановка задачи

Наноструктуры, такие как квантовые точки, квантовые ямы и квантовые проволоки образуются только на грани различных соединений. Например, на грани соединений GaAs и GaAlAs [54-56]. Если твердотельная структура однородна, то в такой структуре не образуются КТ и другие наноструктуры.

Квантовые точки, квантовые проволоки, и квантовые ямы могут быть использованы в качестве новой элементной базы для наноэлектроники [15]. Для применения КТ как элементной базы для наноэлектроники прежде всего нужно управлять электронами в КТ. Для этого надо понимать механизм формирования и определить основные характеристики этих структур. Квантовые точки, квантовые ямы и квантовые проволоки являются квантово-механическим объектом. В этой структуре число частиц, в частности число электронов, ограничено, поэтому мы не можем применить методы квантовой статистики. Таким образом, вся характеристика и свойства этих наноструктур определяются через уравнение Шредингера (УШ). Если свойства и характеристика данного объекта определяются через УШ, то для понимания механизма формирования существенную роль играет вид потенциала взаимодействия, т.е. мы должны определить потенциал запираания электронов в КТ. В КТ происходят запираания электронов, т.е. запираание электрических зарядов в ограниченном объеме.

В твердотельной среде электрические свойства тела определяются фундаментальными физическими величинами, такими как диэлектрическая проницаемость среды. Поэтому предположим, что для образования КТ диэлектрические свойства твердотельной среды играют существенную роль. Во-вторых, из эксперимента, в котором наблюдают образования КТ известно, что КТ образуются только на грани различных соединений. Здесь различия соединений при образовании КТ будем учитывать различием диэлектрической проницаемостью среды.

Мы будем определять механизм формирования двух электроннх КТ. Пусть КТ с двумя электронами образуется на грани двух различных соединений. Диэлектрические проницаемости первой грани обозначим ϵ_1 и вторую – ϵ_2 , а диэлектрическую проницаемость самой КТ обозначим ϵ_d . Согласно условиям, образование КТ выполняется при $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$, т.е. диэлектрические проницаемости двух граней не должны быть одинаковыми. Каждая грань, которая образована КТ состоит из нескольких химических элементов. Однако для простоты мы будем считать, что поверхности этих граней гладкие. В частности при образовании КТ, период решетки в соединениях GaAs и GaAlAs между собой почти одинаковы. Так как GaAs и GaAlAs позволяют создавать решеточно – согласованную гетероструктуру. Это очень важно, потому что при превышении некоторой толщины кристаллической решетке в напряженном среднем слое становится выгодным «отстроиться» от периода решетки окружающего материала. Такое

«отстроение» происходит путем образования многочисленных дефектов кристаллической структуры, что ведет к резкому ухудшению качества структуры. Надо отметить, что и до сих пор гетеропара GaAs/AlGaAs чаще всего используется в исследованиях свойств низкоразмерных полупроводниковых структур.

Мы исходим из того, что при описании механизма формирования квантовых точек с небольшим числом электронов квантово–механические эффекты играют существенную роль. Далее, мы предполагаем, что квантовая яма однородна по диэлектрическим свойствам, а система в целом неоднородна, и должны выполняться условия непрерывности тангенциальных производных потенциалов. Эти предположения приводят к введению эффективного положительного заряда изображений, который ассоциируется с внешними факторами.

Этот прием хорошо известен в электростатике при изучении свойств диэлектриков [57]. Таким образом, мы предполагаем, что существенную роль в формировании потенциала удержания играет заряд изображения, обусловленный, в частности, большой разностью диэлектрических проницаемостей слоев, которые образуют квантовую точку, например вакуум и полупроводник, либо полупроводник и диэлектрик [58, 59].

С другой стороны нам известно, что твердотельные соединения с образованием КТ являются электрически нейтральными, т.е. если образовались электронные КТ, то на грани соединений должны образовываться положительные заряды, которые по сумме равны числу электронов. Величина этих положительных зарядов определена следующим образом:

$$Z_1 = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_d}{\varepsilon_1 + \varepsilon_d} \tilde{Q}, \quad (2.1)$$

где \tilde{Q} - эффективное значение заряда изображения. Из (2.1) видно, что если среда однородна $\varepsilon_1 = \varepsilon_d$, то заряд изображения будет равен нулю $Z_1 = 0$, и соответственно квантовую точку получить невозможно, т.е. КТ не образовалась бы в данной структуре.

Таким образом, наша задача формулируется следующим образом. Мы будем рассматривать четырехтелную кулоновскую систему, состоящую из двух электронов, а также из двух положительных зарядов изображения. В этом случае, вводим два заряда изображения:

$$Z_3 = \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_d)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_d} \cdot Q^{(1)}; \quad Z_4 = \frac{(\varepsilon_2 - \varepsilon_d)}{\varepsilon_2 + \varepsilon_d} \cdot Q^{(2)}, \quad (2.2)$$

где ε_1 и ε_2 - диэлектрические проницаемости первого и второго слоя соответственно, ε_d - диэлектрическая проницаемость квантовой ямы, а $Q^{(1)}$ и

$Q^{(2)}$ – некоторые положительные постоянные, характеризующие электростатические свойства первого и второго слоя соответственно. Введение заряда изображения объясняет механизм запирания электронов в КТ, этот эффект также называется диэлектрическим конфайнментом электронов в КТ [59].

2.2 Гамильтониан взаимодействия системы

Квантовую точку, содержащую небольшое число электронов можно рассматривать как модель атома, в которой аналогом ядра является эффективный положительный заряд изображения. Наша задача определить механизм формирования электронов в КТ. Для этого в механизме формирования электронов в КТ мы рассмотрим многослойную систему. Многослойная система состоит из четырех тел. Пусть m_1, m_2, m_3, m_4 – массы, а $-Z_1e, -Z_2e, Z_3e, Z_4e$ – заряды частиц соответственно. Тогда гамильтониан системы записывается в виде:

$$\begin{aligned}
 H = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 m_j \dot{\vec{r}}_j^2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} * \\
 & * \frac{Z_1 Z_3}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_4}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_4|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} * \\
 & * \frac{Z_2 Z_3}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_2 Z_4}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_4|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_3 Z_4}{|\vec{r}_3 - \vec{r}_4|},
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Здесь ϵ и ϵ_0 – относительная и абсолютная диэлектрические проницаемости среды. В нашем случае мы рассмотрим различные диэлектрические проницаемости среды. Однако при определении константы связи кулоновское взаимодействие ϵ и ϵ_0 считаем одинаковым. Разность диэлектрических проницаемостей среды чувствуем только через заряд изображения.

Проводя замену переменных, переходим к координатам Якоби $\{\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}\}$ и к координате системы центра масс \bar{R} :

$$\begin{aligned}
 \dot{\vec{r}}_1 &= a_2 \dot{\bar{x}} + c_2 \dot{\bar{z}} + \dot{\bar{R}}, \\
 \dot{\vec{r}}_2 &= -a_1 \dot{\bar{x}} + c_2 \dot{\bar{z}} + \dot{\bar{R}}, \\
 \dot{\vec{r}}_3 &= b_2 \dot{\bar{y}} - c_1 \dot{\bar{z}} + \dot{\bar{R}}, \\
 \dot{\vec{r}}_4 &= -b_1 \dot{\bar{y}} - c_1 \dot{\bar{z}} + \dot{\bar{R}},
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

где a , b , c – некоторые постоянные. Эти постоянные будем определять исходя из некоторых дополнительных условий, которые показаны ниже. Прежде всего, рассмотрим кинетическую часть гамильтониана взаимодействия (2.3).

$$\begin{aligned}
& m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + m_2 \dot{\vec{r}}_2^2 + m_3 \dot{\vec{r}}_3^2 + m_4 \dot{\vec{r}}_4^2 = \\
& = m_1 \left[a_2^2 \dot{\vec{x}}^2 + c_2^2 \dot{\vec{z}}^2 + \dot{R}^2 + 2a_2 c_2 \dot{\vec{x}} \dot{\vec{z}} + 2a_2 \dot{\vec{x}} \dot{R} + 2c_2 \dot{\vec{z}} \dot{R} \right] + \\
& + m_2 \left[a_1^2 \dot{\vec{x}}^2 + c_2^2 \dot{\vec{z}}^2 + \dot{R}^2 - 2a_1 c_2 \dot{\vec{x}} \dot{\vec{z}} - 2a_1 \dot{\vec{x}} \dot{R} + 2c_2 \dot{\vec{z}} \dot{R} \right] + \\
& + m_3 \left[b_2^2 \dot{\vec{y}}^2 + c_1^2 \dot{\vec{z}}^2 + \dot{R}^2 - 2b_2 c_1 \dot{\vec{y}} \dot{\vec{z}} + 2b_2 \dot{\vec{y}} \dot{R} - 2c_1 \dot{\vec{z}} \dot{R} \right] + \\
& + m_4 \left[b_1^2 \dot{\vec{y}}^2 + c_1^2 \dot{\vec{z}}^2 + \dot{R}^2 + 2b_1 c_1 \dot{\vec{y}} \dot{\vec{z}} - 2b_1 \dot{\vec{y}} \dot{R} - 2c_1 \dot{\vec{z}} \dot{R} \right].
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Мы требуем, чтобы недиагональные взаимодействия в кинетической части гамильтониана взаимодействия отсутствовали. Это приведет к следующему уравнению.

$$\begin{aligned}
& 2\dot{\vec{x}} \dot{\vec{z}} [m_1 a_2 c_2 - m_2 a_1 c_2] = 0 \\
& 2\dot{\vec{x}} \dot{R} [m_1 a_2 - m_2 a_1] = 0 \\
& 2\dot{\vec{y}} \dot{\vec{z}} [-m_3 b_2 c_1 + m_4 b_1 c_1] = 0 \\
& 2\dot{\vec{y}} \dot{R} [m_3 b_2 - m_4 b_1] = 0 \\
& 2\dot{\vec{z}} \dot{R} [(m_1 + m_2) c_2 - (m_3 + m_4) c_1] = 0
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Из этого уравнения получаем следующие уравнения для постоянной a , b , c :

$$\begin{cases} a_1 + a_2 = 1 \\ m_1 a_2 - m_2 a_1 = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 + b_2 = 1 \\ m_3 b_2 - m_4 b_1 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 1 \\ (m_1 + m_2) c_2 - (m_3 + m_4) c_1 = 0 \end{cases} \tag{2.7}$$

После некоторых алгебраических упрощений из (2.7) находим:

$$\begin{aligned}
a_2 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2}, & a_1 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \\
b_2 &= \frac{m_4}{m_3 + m_4}, & b_1 &= \frac{m_3}{m_3 + m_4} \\
c_2 &= \frac{m_3 + m_4}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4}, & c_1 &= \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4}.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Из (2.8) видно, что постоянные a , b , c описываются через масс системы. Согласно (2.4), переход к системе центра масс записывается в виде:

$$\begin{aligned}
\vec{r}_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{x} + \frac{m_3 + m_4}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \vec{z} + \vec{R}, \\
\vec{r}_2 &= -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{x} + \frac{m_3 + m_4}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \vec{z} + \vec{R}, \\
\vec{r}_3 &= \frac{m_4}{m_3 + m_4} \vec{y} - \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \vec{z} + \vec{R}, \\
\vec{r}_4 &= -\frac{m_3}{m_3 + m_4} \vec{y} - \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \vec{z} + \vec{R}.
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Учитывая это преобразование, кинетическая часть записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \dot{\vec{x}}^2 (m_1 a_2^2 + m_2 a_1^2) &= \frac{1}{2} \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2} \dot{\vec{x}}^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_x} \vec{P}_x^2, \\
\frac{1}{2} \dot{\vec{y}}^2 (m_3 b_2^2 + m_1 b_1^2) &= \frac{1}{2} \frac{m_3 \cdot m_4}{m_3 + m_4} \dot{\vec{y}}^2 = \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_y} \vec{P}_y^2, \\
\frac{1}{2} \dot{\vec{z}}^2 ((m_1 + m_2) c_2^2 + (m_3 + m_4) c_1^2) &= \\
= \frac{1}{2} \frac{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \dot{\vec{z}}^2 &= \frac{1}{2} \frac{1}{\mu_z} \vec{P}_z^2.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

где μ_x - приведенная масса 1 и 2 частиц; μ_y - приведенная масса 3 и 4 частиц, а μ_z - приведенная масса блока, состоящая из 1, 2 и 3, 4 частиц, и эти приведенные массы определяются следующим образом:

$$\mu_x = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mu_y = \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4}; \quad \mu_z = \frac{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \quad (2.11)$$

Теперь переходим к системе центра масс для потенциала взаимодействия

$$\begin{aligned} \bar{r}_1 - \bar{r}_2 &= (a_2 + a_1)\bar{x} = \bar{x}, \\ \bar{r}_1 - \bar{r}_3 &= a_2\bar{x} - b_2\bar{y} + (c_1 + c_2)\bar{z} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\bar{x} - \frac{m_4}{m_3 + m_4}\bar{y} + \bar{z}, \\ \bar{r}_1 - \bar{r}_4 &= a_2\bar{x} + b_1\bar{y} + (c_1 + c_2)\bar{z} = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\bar{x} + \frac{m_3}{m_3 + m_4}\bar{y} + \bar{z}, \\ \bar{r}_2 - \bar{r}_3 &= -a_1\bar{x} - b_2\bar{y} + (c_1 + c_2)\bar{z} = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\bar{x} - \frac{m_4}{m_3 + m_4}\bar{y} + \bar{z}, \\ \bar{r}_2 - \bar{r}_4 &= -a_1\bar{x} + b_1\bar{y} + (c_1 + c_2)\bar{z} = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\bar{x} + \frac{m_3}{m_3 + m_4}\bar{y} + \bar{z}, \\ \bar{r}_3 - \bar{r}_4 &= (b_1 + b_2)\bar{y} = \bar{y} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Из (2.12) видно, что потенциал взаимодействия не зависит от R .

Учитывая (2.12), (2.10) и после некоторых упрощений из (2.3) для гамильтониана взаимодействия системы центра масс получим:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \cdot \bar{x}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4} \cdot \bar{y}^2 + \frac{1}{2} \frac{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \cdot \bar{z}^2 + \\ &+ \frac{Z_1 Z_2 \alpha}{|\bar{x}|} - \frac{Z_1 Z_3 \alpha}{\left| \frac{m_2}{m_1 + m_2} \bar{x} - \frac{m_4}{m_3 + m_4} \bar{y} + \bar{z} \right|} - \frac{Z_1 Z_4 \alpha}{\left| \frac{m_2}{m_1 + m_2} \bar{x} + \frac{m_3}{m_3 + m_4} \bar{y} + \bar{z} \right|} - \\ &- \frac{Z_2 Z_3 \alpha}{\left| \frac{m_1}{m_1 + m_2} \bar{x} - \frac{m_4}{m_3 + m_4} \bar{y} - \bar{z} \right|} - \frac{Z_2 Z_4 \alpha}{\left| \frac{m_1}{m_1 + m_2} \bar{x} - \frac{m_3}{m_3 + m_4} \bar{y} - \bar{z} \right|} + \frac{Z_3 Z_4 \alpha}{|\bar{y}|}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

В (2.13) кинетические слагаемые связанные с системами центра масс R опущены. Здесь m_1 и m_2 – массы электронов в КТ, а m_3 и m_4 – массы иона первого и второго слоя соответственно.

Мы предполагаем, что заряд изображения связан с ионами в слое, поэтому массу заряда изображений считаем намного большей, чем масса электрона в КТ. Это реально соответствует экспериментальным результатам. Тогда для массы четырехтельной кулоновской системы можно установить следующие соотношения:

$$m_1 = m_2 = m_e; \quad m_3 \gg m_e; \quad m_4 \gg m_e.$$

Таким образом, в этом приближении для приведенных масс из (2.11) имеем:

$$\mu_x = \frac{m_e}{2}; \quad \mu_y = \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4}; \quad \mu_z \cong 2m_e. \quad (2.14)$$

при $m_3 \cong m_4 = m_0$ для приведенных масс, получаем $\mu_y = \frac{1}{2}m_0$.

В этом данном приближении гамильтониан взаимодействия (2.13) относительного движения записывается окончательно в следующем виде:

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2\mu_x} \bar{P}_x^2 + \frac{1}{2\mu_y} \bar{P}_y^2 + \frac{1}{2\mu_z} \bar{P}_z^2 + \frac{Z_1 Z_2 \alpha}{\bar{x}} - \\ & - \frac{Z_1 Z_3 \alpha}{\left| \frac{1}{2} \bar{x} - \frac{1}{2} \bar{y} + \bar{z} \right|} - \frac{Z_1 Z_4 \alpha}{\left| \frac{1}{2} \bar{x} + \frac{1}{2} \bar{y} + \bar{z} \right|} - \frac{Z_2 Z_3 \alpha}{\left| \frac{1}{2} \bar{x} + \frac{1}{2} \bar{y} - \bar{z} \right|} \\ & - \frac{Z_2 Z_4 \alpha}{\left| \frac{1}{2} \bar{x} - \frac{1}{2} \bar{y} - \bar{z} \right|} + \frac{Z_3 Z_4 \alpha}{\bar{y}}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

При дальнейших вычислениях переходим к безразмерным переменам, поэтому вводим замену переменных

$$\frac{\sqrt{m_e}}{\hbar} \bar{x} = \bar{q}; \quad \frac{\sqrt{m_0}}{\hbar} \bar{y} = \bar{Q}; \quad \frac{\sqrt{2\mu_z}}{\hbar} \bar{z} = \bar{S}, \quad (2.16)$$

или

$$\bar{x} = \frac{\hbar}{\sqrt{m_e}} \cdot \bar{q}; \quad \bar{y} = \frac{\hbar}{\sqrt{m_0}} \cdot \bar{Q}; \quad \bar{z} = \frac{\hbar}{2\sqrt{m_e}} \cdot \bar{S}. \quad (2.17)$$

Рассмотрим каждое слагаемое кинетической энергии по отдельности

$$\vec{P}_x = -i\hbar\vec{\nabla}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{x}} = -i\hbar\frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{q}} = -i\sqrt{m_e}\frac{\partial}{\partial\vec{q}} = \sqrt{m_e}\vec{P}_q, \quad (2.18)$$

Учитывая это, для \vec{P}_x получим

$$\frac{1}{2\mu_x}\cdot\vec{P}_x^2 = \frac{1}{2\mu_x}\cdot m_e\cdot\vec{P}_q^2 = 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_q^2, \quad (2.19)$$

аналогичным образом для импульса \vec{P}_y и \vec{P}_z имеем

$$\frac{1}{2\mu_y}\vec{P}_y^2 = 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_Q^2, \quad \frac{1}{2\mu_z}\vec{P}_z^2 = 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_S^2. \quad (2.20)$$

Таким образом, безразмерный гамильтониан относительного движения имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} H = & 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_q^2 + 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_Q^2 + 2\cdot\frac{1}{2}\vec{P}_S^2 + \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{Z_1Z_2\alpha}{q} - \\ & - \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{2Z_1Z_3\alpha}{|\vec{q}-u\vec{Q}+\vec{S}|} - \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{2Z_1Z_4\alpha}{|\vec{q}+u\vec{Q}+\vec{S}|} - \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\frac{2Z_2Z_3\alpha}{|\vec{q}+u\vec{Q}-\vec{S}|} - \\ & - \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{2Z_2Z_4\alpha}{|\vec{q}-u\vec{Q}-\vec{S}|} + \frac{\sqrt{m_e}}{\hbar}\cdot\frac{Z_3Z_4\alpha}{uQ}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Здесь введено обозначение:

$$u = \sqrt{\frac{m_e}{m_0}}. \quad (2.22)$$

Мы должны определить из УШ для гамильтониана, представленного в (2.21), собственное значение и собственную функцию гамильтониана. Для этого используем следующие предположения: во-первых, ионы в слоях сравнительно тяжелее электрона; во-вторых, параметр u , определенный в (2.22), считаем малым и проводим разложение по степеням этого малого параметра. В этом приближении компоненты вектора \vec{q} , \vec{Q} выглядят следующим образом:

$$\bar{q}\{0, 0, q\},$$

$$\bar{Q}\left\{0, \sqrt{\bar{Q}^2 - \frac{(\bar{q}\bar{Q})^2}{\bar{q}^2}}, \sqrt{\frac{(\bar{q}\bar{Q})^2}{\bar{q}^2}}\right\}. \quad (2.23)$$

Компоненты вектора \bar{S} выбираем в обычной сферической системе координат:

$$\bar{S} = \{S_1 \Rightarrow S \cos \varphi \sin \theta, S_2 \Rightarrow S \sin \varphi \sin \theta, S_3 \Rightarrow S \cos \theta\} \quad (2.24)$$

Для этих векторов выполняются следующие тождества:

$$\begin{aligned} q &= \sqrt{\bar{q}^2}; & Q &= \sqrt{\bar{Q}^2}; \\ (\bar{q}\bar{Q}) &= q \cdot Q \cdot \cos \alpha; & (\bar{q}\bar{S}) &= q \cdot S \cdot \cos \theta; \\ (\bar{Q}\bar{S}) &= S(\sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta + \cos \alpha \cdot \cos \theta). \end{aligned} \quad (2.25)$$

При таком выборе компоненты векторов $(\bar{q}, \bar{Q}, \bar{S})$ различные алгебраические выражения, входящие в гамильтониан (2.21), записываются в следующем виде:

$$\begin{aligned} |\bar{q} - u\bar{Q} + \bar{S}| &= \sqrt{(\bar{q} - u\bar{Q} + \bar{S})^2} = \\ &= \sqrt{q^2 + u^2 Q^2 + S^2 - 2uqQ \cdot \cos \alpha + 2qS \cdot \cos \theta - 2uQS \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta - 2uQS \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta} \\ &\Rightarrow \sqrt{q^2 + S^2 + 2qS \cdot \cos \theta - 2uqQ \cdot \cos \alpha - 2uQS \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta - 2uQS \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta} = \\ &= \sqrt{q^2 + S^2 + 2qS \cos \theta} \sqrt{1 - \frac{2uQ}{(\bar{q} + \bar{S})} (q \cdot \cos \alpha + S \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta + S \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta)} = \\ &= \sqrt{(\bar{q} + \bar{S})^2} - \frac{uQ}{|\bar{q} + \bar{S}|} [q \cdot \cos \alpha + S \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta + S \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Далее, проводим некоторые вычисления

$$|\bar{q} + \bar{S} - u\bar{Q}| |\bar{q} + \bar{S} + u\bar{Q}| = \sqrt{(\bar{q} + \bar{S})^4 + u^4 \bar{Q}^4 + 2u^2 (\bar{q} + \bar{S})^2 \bar{Q}^2 - 4u^2 (\bar{q}\bar{Q} + \bar{S}\bar{Q})^2}$$

и,

$$\begin{aligned} \frac{Z_3}{|\bar{q} + \bar{S} - u\bar{Q}|} + \frac{Z_4}{|\bar{q} + \bar{S} + u\bar{Q}|} &\Rightarrow \frac{1}{(\bar{q} + \bar{S})^2} \cdot [Z_3 |\bar{q} + \bar{S} + u\bar{Q}| + Z_4 |\bar{q} + \bar{S} - u\bar{Q}|] = \\ &= \frac{1}{(\bar{q} + \bar{S})^2} \cdot \left[(Z_3 + Z_4) \sqrt{(\bar{q} + \bar{S})^2} + \frac{uQ(Z_3 - Z_4)}{\sqrt{(\bar{q} + \bar{S})^2}} \cdot (q \cdot \cos \alpha + S \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta + \right. \\ &+ S \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta) \Big] = \frac{Z_3 + Z_4}{|\bar{q} + \bar{S}|} + \frac{uQ(Z_3 - Z_4)}{\left[(\bar{q} + \bar{S})^2 \right]^{3/2}} \cdot (q \cdot \cos \alpha + S \cos \alpha \cdot \cos \theta + \\ &+ S \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Также,

$$\begin{aligned} \frac{Z_3}{|\bar{q} - \bar{S} + u\bar{Q}|} + \frac{Z_4}{|\bar{q} - \bar{S} - u\bar{Q}|} &= \frac{Z_3 + Z_4}{|\bar{q} - \bar{S}|} - \frac{uQ(Z_3 - Z_4)}{\left[(\bar{q} - \bar{S})^2 \right]^{3/2}} \times \\ &\times (q \cdot \cos \alpha + S \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta + S \cdot \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta). \end{aligned}$$

КТ образуется в тонкопленочной кристаллической структуре, и потенциал удержания характеризуется достаточно сильным запирающим по одной из трех координатных осей. В результате этого, низко лежащие квантовые возбуждения определяются свойствами потенциала удержания по оставшимся двум осям. Поэтому нам достаточно рассмотреть двухмерную систему с учетом свойства граней и особенности КТ. Следовательно, с геометрической точки зрения, квантовые точки можно рассматривать как эффективные двухмерные системы.

Разлагая по степеням малого параметра $u \ll 1$, учитывая (2.27), (2.26), гамилтониан (2.21) относительного движения записываем следующим образом:

$$\begin{aligned}
H_{rm} = & 2 \left\{ \frac{1}{2} \bar{P}_q^2 + \frac{1}{2} \bar{P}_Q^2 + \frac{1}{2} \bar{P}_S^2 + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\omega_c^2}{16} \rho_q^2 - \frac{\hbar \omega}{4} i \frac{\partial}{\partial \varphi_q} + \frac{l_0}{a^*} \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{2q} + \right. \\
& + \frac{l_0}{a^*} \cdot \frac{Z_3 Z_4}{2u} \cdot \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{Q} - \frac{l_0}{a^*} (Z_3 + Z_4) \sqrt{\hbar \omega_0} \left[\frac{1}{|\bar{q} + \bar{S}|} + \frac{1}{|\bar{q} - \bar{S}|} \right] - \\
& \left. - \frac{l_0 (Z_3 - Z_4) \sqrt{\hbar \omega_0}}{a^*} \cdot \left[\frac{1}{\left[(\bar{q} + \bar{S})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} - \frac{1}{\left[(\bar{q} - \bar{S})^2 \right]^{\frac{3}{2}}} \right] \cdot u Q^* \right. \\
& \left. * (q \cdot \cos \alpha + S \cdot \cos \alpha \cdot \cos \theta + S \sin \alpha \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta) \right\}.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Здесь $a_b = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2$ - радиус Бора; $a^* = a_b \epsilon m_e / m_e^*$ - эффективный радиус Бора; l_0 - характеристическая длина квантовой точки [7, 13], образованной на границе двух сред, и определяется следующим образом:

$$l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega_0}}, \tag{2.29}$$

Используя предположения о том, что ионы в слоях сравнительно тяжелее электрона, а движение ограничено, поэтому при дальнейших вычислениях будем считать, что $Q = const$, т.е. $\bar{P}_Q = 0$. В этом приближении вектор \bar{Q} рассматривается как внешний параметр, и компоненты выражаются следующим образом: $\bar{q}(0, q)$. Компоненты векторов \bar{Q} и \bar{S} выбираем в виде:

$$\begin{aligned}
\bar{Q} & \left(0, \sqrt{\frac{(\bar{q}\bar{Q})^2}{\bar{q}^2}} \right), & \bar{S} & \Rightarrow S_1 = S \cdot \cos \varphi \\
& & & S_2 = S \cdot \sin \varphi
\end{aligned}$$

Для этих векторов скалярное произведение определяется следующим образом:

$$\begin{aligned}
(\bar{q}\bar{Q}) & = q \cdot Q \cdot \cos \alpha \\
(\bar{q}\bar{S}) & = S \cdot q \cdot \sin \varphi \\
(\bar{Q}\bar{S}) & = S \cdot Q \cdot \sin \varphi \cdot \cos \alpha,
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Выбирая компоненты вектора \vec{S} в обычной сферической системе координат, для компонента векторов $(\vec{q}, \vec{Q}, \vec{S})$ в различных алгебраических выражениях записываем в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 |\vec{q} - u\vec{Q} + \vec{S}| &= \sqrt{(\vec{q} + \vec{S})^2 - 2u(\vec{q}\vec{Q}) - 2u(\vec{S}\vec{Q})} = \\
 &= |\vec{q} + \vec{S}| \sqrt{1 - \frac{2u}{|\vec{q} + \vec{S}|^2} \cdot (q \cdot Q \cdot \cos \alpha + SQ \cdot \sin \varphi \cdot \cos \alpha)} = \\
 &= |\vec{q} + \vec{S}| \sqrt{1 - \frac{2u}{|\vec{q} + \vec{S}|^2} \cdot Q \cdot \cos \alpha (q + S \cdot \sin \varphi)}.
 \end{aligned} \tag{2.31}$$

Таким образом, разлагая по степеням малого параметра $u \ll 1$, мы находили гамильтониан относительного движения (1.28). Полученные выражения для компонента векторов $(\vec{q}, \vec{Q}, \vec{S})$ будем применять при дальнейших вычислениях.

2.3 Гамильтониан взаимодействия двухмерной системы во внешнем магнитном поле

Мы рассмотрим двухмерную систему во внешнем магнитном поле. Предполагаем, что КТ находится во внешнем постоянном магнитном поле, и также считаем, что внешнее магнитное поле и плоскость низкоразмерной твердотельной структуры пересекаются вдоль вектора \vec{Q} .

Тогда гамильтониан системы (2.28) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \frac{1}{m_j} \left(\vec{P}_j + \frac{e}{c} \vec{A}(r_j) \right)^2 + \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_2 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \\
 &- \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_3 e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_3|} - \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_3 Z_2 e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_3|}.
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Здесь ϵ и ϵ_0 – относительная и абсолютная диэлектрические проницаемости среды, а $\vec{A}(r)$ – вектор потенциал, который определяется стандартным образом:

$$\vec{A}(r) = \frac{1}{2} [\vec{B}, \vec{r}], \tag{2.33}$$

где \vec{B} - напряженность внешнего магнитного поля.

В квантовых точках потенциал удержания характеризуется достаточно сильным запираем по одной из трех координатных осей. Следовательно, с геометрической точки зрения, квантовые точки можно рассматривать как эффективные двумерные системы. Внешнее магнитное поле можно сориентировать, например, в плоскости, перпендикулярной к плоскости квантовой точки. Предположим, что пересечение этих плоскостей является линейным и направляется только по \vec{Q} или

$$\vec{A}(\vec{Q}) = 0.$$

Проводя вычисления, учитывая (2.31), гамильтониан относительного движения (2.28) разложим по степеням малого параметра $u \ll 1$, тогда гамильтониан относительного движения записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} H = & 2 \left\{ \frac{1}{2} \vec{P}_q^2 + \frac{1}{2} \vec{P}_S^2 + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{16} \rho_q^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} i \frac{\partial}{\partial \varphi_q} + \frac{l_0}{2a^*} \cdot \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{q} - \right. \\ & \left. - \frac{l_0}{a^*} \cdot \frac{Z_3 \sqrt{\hbar \omega_0}}{|\vec{q} + \vec{S}|} \cdot \left[1 + \frac{uQ \cdot \cos \alpha}{|\vec{q} + \vec{S}|^2} \cdot (q + S \cdot \sin \varphi) \right] - \frac{l_0}{a^*} \frac{Z_4 \sqrt{\hbar \omega_0}}{|\vec{q} + \vec{S}|} * \right. \\ & * \left[1 - \frac{uQ \cdot \cos \alpha}{|\vec{q} + \vec{S}|^2} (q + S \cdot \sin \varphi) \right] - \frac{l_0}{a^*} \frac{Z_3 \sqrt{\hbar \omega_0}}{|\vec{q} - \vec{S}|} \left[1 - \frac{uQ \cdot \cos \alpha}{|q - S|^2} (q - S \cdot \sin \varphi) \right] - \quad (2.34) \\ & \left. - \frac{l_0}{a^*} \cdot \frac{Z_4 \sqrt{\hbar \omega_0}}{|\vec{q} - \vec{S}|} \cdot \left[1 + \frac{uQ \cos \alpha}{|q - S|^2} (q - S \cdot \sin \varphi) \right] \right\}. \end{aligned}$$

где $\omega_c = eB/(cm^*)$ - циклотронная частота и B – напряженность внешнего магнитного поля.

После ряда упрощений, для гамильтониана имеем:

$$\begin{aligned}
H = & 2 \left\{ \frac{1}{2} \bar{P}_q^2 + \frac{1}{2} \bar{P}_s^2 + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{16} \cdot \rho_q^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} i \frac{\partial}{\partial \varphi_q} + \frac{l_0}{2a^*} \cdot \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{q} - \right. \\
& - \frac{l_0}{a^*} \cdot \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{|\bar{q} + \bar{S}|} \cdot \left[Z_3 + Z_4 + (Z_3 - Z_4) \cdot \frac{uQ \cdot \cos \alpha}{|\bar{q} + \bar{S}|^2} \cdot (q + S \cdot \sin \varphi) \right] - \\
& \left. - \frac{l_0}{a^*} \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{|\bar{q} - \bar{S}|} \cdot \left[Z_3 + Z_4 - (Z_3 - Z_4) \cdot \frac{uQ \cdot \cos \alpha}{|\bar{q} - \bar{S}|^2} \cdot (q - S \cdot \sin \varphi) \right] \right\}. \quad (2.35)
\end{aligned}$$

Из (2.35) видно, что учет многослойности нанокристаллических твердотельных структур при условии, что массы зарядов изображений, которые описывают влияние каждого слоя для формирования нанокристаллических структур, больше чем масса электрона, находящегося в квантовой яме, что приводит к появлению дополнительного взаимодействия: кулоновского взаимодействия суммарного заряда изображений с каждым электроном в квантовой яме и дипольного взаимодействия между различными слоями. Однако в приближении $u \ll 1$ дипольное взаимодействие становится малым по сравнению с кулоновским взаимодействием.

Если $u = 0$, то дипольные взаимодействия, которые связаны с зарядовой асимметрией, отсутствуют. В этом случае общий заряд равен сумме изображенных зарядов, который соответствует каждой грани $Z_{uz} = Z_3 + Z_4 + \dots$, и в таком случае гамильтониан взаимодействия имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
H_r^{(0)} = & 2 \left\{ \frac{1}{2} \bar{P}_q^2 + \frac{1}{2} \bar{P}_s^2 + \frac{\hbar^2}{2} \frac{\omega_c^2}{16} \rho_q^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} i \frac{\partial}{\partial \varphi_q} + \frac{l_0}{2a^*} \cdot \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{q} - \right. \\
& \left. - \frac{l_0}{a^*} \cdot \sqrt{\hbar \omega_0} (Z_3 + Z_4) \left[\frac{1}{|\bar{q} + \bar{S}|} + \frac{1}{|\bar{q} - \bar{S}|} \right] \right\}. \quad (2.36)
\end{aligned}$$

Таким образом, (2.35) есть окончательный гамильтониан взаимодействия относительного движения. Из УШ для гамильтониана взаимодействия мы должны определить потенциал взаимодействия двух электронов. Потенциал взаимодействия определяется как терм внутренних систем. Поэтому далее определяем энергетический терм, который описывает каждую грань пересечения КТ со слоями по отдельности.

2.4 Краткие выводы

При описании механизма формирования квантовых точек квантово - механические эффекты играют существенную роль, и мы предполагаем, что квантовая яма однородна по диэлектрическим свойствам, а система в целом неоднородна, и при этом должны выполняться условия непрерывности тангенциальных производных потенциалов. Исходя из этих предположений, введен заряд изображения, который обусловлен большой разностью диэлектрических проницаемостей слоев.

Учет многослойности нанокристаллических структур приводит к четырехтелному парному кулоновскому взаимодействию. Влияние граней учитывается зарядом изображений, обусловленного разностью диэлектрических проницаемостей слоев и определен гамильтониан взаимодействия для четырехтелной системы.

Предполагаем, что массы зарядов изображений, которые описывают влияние каждого слоя в формировании нанокристаллических структур, больше, чем масса электрона, находящегося в квантовой точке, а также размер квантовых точек, т.е. расстояние между гранями при стационарном состоянии не изменяется. Исходя из этого, определен окончательный гамильтониан взаимодействия, с учетом свойств слоя. Гамильтониан также содержит дипольное взаимодействие, которое обуславливается асимметрией зарядов.

Все наноструктуры образуются в тонкопленочной кристаллической структуре, поэтому мы должны перейти в двухмерную систему отсчета. Таким образом, мы рассматриваем гамильтониан двухмерной системы. В таких случаях наш гамильтониан переходит к трехтелному кулоновскому взаимодействию, который представлен в (2.35).

ГЛАВА 3 ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМА ФОРМИРОВАНИЯ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ В ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ НАНОСТРУКТУРЕ

3.1 Постановка задачи

В последнее время усилился интерес к исследованию явлений самоорганизации в процессах выращивания полупроводниковых гетероструктур и их использованию для создания квазидвумерных и квазиульмерных структур. Это связано с тем, что такие низкоразмерные малочастичные электронные системы, образованные в тонкопленочных слоях, представляют большой интерес как с теоретической [54, 55], так и с экспериментальной [56] точки зрения. Одной из основных проблем является выяснение формирования потенциала удержания электронов в КТ, образованной в полупроводниковой гетероструктуре.

В КТ находится два электрона, взаимодействующие между собой парным кулоновским взаимодействием. Из эксперимента известно, что потенциал запирания электронов появляется в конечном объеме [54, 60]. Это означает, что при формировании КТ между электронами появляется удерживающая сила кулоновского отталкивания. Известно, что электронный газ, состоящий без конечного числа электронов, во внешнем сильном магнитном поле образует кристалл, т.е. расстояние между электронами является постоянным. Мы предполагаем, что взаимодействия между электронами в КТ, также образуют сильно связанную гантель. При таком предположении для определения энергетического спектра мы можем применить адиабатическое приближение [61, 62].

Адиабатическое приближение метод приближенного решения задач квантовой механики, применяемый для описания квантовых систем, в которых можно выделить быструю и медленную подсистемы, т.е. заключается в приближенном разделении “быстрых” и “медленных” переменных динамической системы. Исходная задача решается в два этапа: сначала рассматривается движение быстрой подсистемы при фиксированных координатах медленной подсистемы, а затем учитывается движение последней. Термин адиабатический строго означает, что этой величиной является энергия, однако его также применяют и к процессам с другими сохраняющимися параметрами. В квантовой механике основы адиабатического приближения были заложены Борном и Опенгеймером [63], а затем Борном и Фоком [64] для решения УШ. Отметим, что приближение Борна-Опенгеймера (ПБО) - вариация адиабатического приближения, когда при описании быстрых переменных используется не просто фиксированное значение медленных, а их равновесное значение. В данной главе изложим детали применения адиабатического приближения для решения УШ в кулоновской трехтельной системе в рамках метода ОП.

Если определим энергетический спектр трехтельной кулоновской системы, в рамках адиабатического приближения, то система разделяются на две части: внешние и внутренние системы. Энергетический спектр внутренней системы

обычно называется термами. Эти термы для внешних систем рассматриваются как потенциал взаимодействия.

Используя гипотезу о том, что эффективный потенциал удержания электронов в квантовой точке соответствует потенциалу параболического конфайнмента, удастся описать [4-7] характерные особенности транспортных явлений [8] и осцилляции спина основного состояния квантовой точки в магнитном поле [9, 10]. Однако на расстояниях от десятков до сотен *нм* между атомами и молекулами действуют только кулоновские силы. Кулоновский потенциал в квантовой точке сильно отличается от потенциала параболического конфайнмента. Таким образом, для объяснения механизма формирования квантовых точек необходимо объяснить механизм возникновения потенциала параболического конфайнмента, т.е. определить условия перехода от кулоновского потенциала взаимодействия к потенциалу параболического конфайнмента.

С другой стороны в зависимости от условий эксперимента электронные корреляции могут существенно влиять на характер потенциала удержания. В частности, описание экспериментов с фотоизлучением [11] в квантовой точке требует введения ангармонических поправок [12, 13] к потенциалу параболического конфайнмента. Если искусственно ввести ангармоническую поправку к потенциалу параболического конфайнмента, то нарушается условие теоремы Кона [14], т.е. электрон - электронное взаимодействие зависит только от относительных расстояний. Поэтому, выяснение механизма возникновения ангармонических поправок также является важнейшей проблемой при исследовании механизма формирования КТ с кулоновским взаимодействием.

Таким образом, квантовая точка находится во внешнем магнитном поле, поэтому согласно (2.35) УШ для гамильтониана взаимодействие определяется в следующем виде

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{1}{2} \bar{P}_R^2 + \frac{1}{2} \bar{P}_r^2 + \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{16} \rho_R^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} \cdot i \frac{\partial}{\partial \varphi_R} + \frac{\hbar}{2a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R} - \right. \\
 & \left. - \frac{\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \left[\frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}|} + \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}|} \right] - \frac{\hbar(Z_3 - Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} * \right. \\
 & \left. * \left[\frac{uz}{|\vec{R} + \vec{r}|^3} (R_z + r_z) - \frac{uz}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} (R_z - r_z) \right] \right\} \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r})
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Для решения этой задачи мы используем адиабатическое приближение. В адиабатическом приближении волновая функция (ВФ) системы представляется в виде:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{R}) \cdot \Phi(R, \vec{r}), \quad (3.2)$$

где $\Phi(R, \vec{r})$ - волновая функция внутренней системы, а $\chi(\vec{R})$ - волновая функция внешней системы.

3.2 Определение энергетического термина внутренней системы

В адиабатическом приближении переменная R рассматривается как внешний параметр, т.е. $R = \text{const}$.

Вектор \vec{r} представим в цилиндрической системе координат $\vec{r} = \{\rho, r_z, \varphi\}$. Тогда волновая функция $\Phi(R, \vec{r})$ принимает вид

$$\Phi(R, \vec{r}) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{\pi}} \cdot \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z). \quad (3.3)$$

Здесь φ -азимутальный угол, а m – магнитное квантовое число. Учитывая (3.3), после некоторых упрощений для УШ из (2.35) имеем

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_z^2} \right] - \frac{\lambda_+}{|\vec{R} + \vec{r}|} - \frac{\lambda_+}{|\vec{R} - \vec{r}|} - \frac{\lambda_-}{|\vec{R} + \vec{r}|^3} (R_z + r_z) + \right. \\ \left. + \frac{\lambda_-}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} (R_z - r_z) \right\} \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z) = E_r(R) \cdot \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z), \quad (3.4)$$

где $E_r(R)$ - является энергетическим спектром внутренней системы; также введены следующие обозначения

$$\lambda_+ = \frac{\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}}; \quad \lambda_- = \frac{\hbar(Z_3 - Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot (u \cdot z). \quad (3.5)$$

Проводя замену переменных

$$\rho = 2 \cdot \sqrt{\rho_1 \rho_2}, \quad r_z = (\rho_1 - \rho_2) \quad (3.6)$$

и переходя к параболической системе координат, из (3.4) после некоторых упрощений получаем

$$\begin{aligned}
& \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\rho_1 \frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_2} - \frac{m^2}{4\rho_1} - \frac{m^2}{4\rho_2} \right] - (\rho_1 + \rho_2) E_r - \right. \\
& - \frac{\lambda_+ \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 + 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2}} - \\
& - \frac{\lambda_+ \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 - 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2}} - \frac{\lambda_- \cdot (\rho_1 + \rho_2)(R_z + (\rho_1 - \rho_2))}{\left((\rho_1 + \rho_2)^2 + 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2 \right)^{3/2}} + \quad (3.7) \\
& \left. + \frac{\lambda_- \cdot (\rho_1 + \rho_2)(R_z - (\rho_1 - \rho_2))}{\left((\rho_1 + \rho_2)^2 - 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2 \right)^{3/2}} \right\} \tilde{\Phi}_m(R; \rho_1, \rho_2) = 0.
\end{aligned}$$

При дальнейших вычислениях будем предполагать, что вектор \vec{R} направлен вдоль внешнего вектора \vec{z} , т.е. $R_z = R \cdot \cos \alpha = R$.

В (3.7) переменная R рассматривается как внешний параметр. Обычно стандартные вычисления проводят в вытянутых сфероидальных координатах [65], при этом параметр R определяет фокусное расстояние, а $E_r(R)$ называется термом энергетических уровней. В вытянутых сфероидальных системах координаты УШ, представленные в (3.7), допускают разделение переменных и получается два уравнения, которые решаются только методами численных вычислений (подробно см. в [66-68]).

Для определения энергетического термина $E_r(R)$ из (3.7) применим метод ОП. Перед тем как определить энергетический спектр и волновую функцию из УШ (3.7) с помощью метода ОП [69, 70] уместно напомнить, что этот метод основан на идеях и методах квантовой теории скалярного поля. Одним из существенных отличий квантовой теории поля от квантовой механики является то, что квантованные поля, представляющие набор бесконечного числа осцилляторов для основного состояния или вакуума при квантово-полевом взаимодействии сохраняют свою осцилляторную природу. В квантовой механике собственные функции для большинства потенциалов, как правило, отличаются от гауссовского поведения осцилляторной волновой функции. Поэтому для применения методов и идей теории поля к решению квантово-механических задач следует в исходном радиальном УШ провести замену переменных таким образом, чтобы искомая волновая функция на больших расстояниях обладала гауссовским поведением, а трансформированное уравнение идентифицировать с радиальным УШ в пространстве с большой размерностью [69, 70]. Отметим, что впервые похожая идея обсуждалась Фоком при решении задачи о спектре атома водорода с помощью трансформации в четырехмерном пространстве импульсов [71].

Следуя Фоку [72], будем считать асимптотическое поведение волновой функции внутренней системы кулоновским. В соответствии с изложенным выше проведем замену переменных следующим образом (детали см. в [69, 70]):

$$\rho_k = q_k^2; \tilde{\Phi}_m = q_1^{|m|} q_2^{|m|} \psi_m(q_1^2, q_2^2), \quad k=1,2. \quad (3.8)$$

Используя атомную систему единиц ($\hbar=1, e=1, c=1$), получим из (3.7) для УШ в R^d :

$$\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} + \frac{d-1}{q_j} \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \right] - \frac{4\lambda_+(q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2}} - \right. \\ \left. - \frac{4\lambda_+(q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2}} - \frac{4\lambda_-(q_1^2 + q_2^2)(R + (q_1^2 - q_2^2))}{\left[(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2 \right]^{3/2}} - \right. \\ \left. - 4E_r(q_1^2 + q_2^2) + \frac{4\lambda_-(q_1^2 + q_2^2)(R - (q_1^2 - q_2^2))}{\left[(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2 \right]^{3/2}} \right\} \Psi_m(q_1^2, q_2^2) = 0. \quad (3.9)$$

где d – размерность вспомогательного пространства, которая равна

$$d = 2 + 2|m|. \quad (3.10)$$

где m – магнитное квантовое число.

В результате замены переменных мы получили модифицированное УШ в d -мерном вспомогательном пространстве R^d . Из (3.9) и (3.10) следует, что магнитное квантовое число m поглощено в размерность пространства d . Данный прием позволяет определить все интересующие нас характеристики, т.е. спектр и волновую функцию, решая модифицированное УШ только для основного состояния в d -мерном вспомогательном пространстве R^d . Волновая функция $\psi_m(q_1^2, q_2^2)$ основного состояния в R^d зависит только от переменных q_1^2 и q_2^2 . Тогда оператор

$$\frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + \frac{d-1}{q_k} \frac{\partial}{\partial q_k} \equiv \Delta_{qk}, \quad k=1, 2, \quad (3.11)$$

отождествим с Лапласианом Δ_{q_k} во вспомогательном пространстве R^d , который действует на волновую функцию основного состояния, зависящую только от радиуса q_k . Исходя из модифицированного УШ

$$H\psi_m(q_1, q_2) = \varepsilon(E_r)\psi_m(q_1, q_2), \quad (3.12)$$

согласно (3.9), мы получаем, что энергетический спектр в R^d

$$\varepsilon(E_r) = 0, \quad (3.13)$$

т.е. энергетический спектр равен нулю. Будем рассматривать это соотношение как условие определения энергетического спектра E_r исходного гамильтониана (3.7). Следуя методу ОП, представим канонические переменные через операторы рождения и уничтожения в d – мерном пространстве

$$q_j^{(k)} = \frac{a_j^k + a_j^{k+}}{\sqrt{2\omega_k}}; \quad P_j^{(k)} = \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \frac{a_j^k - a_j^{k+}}{i}; \quad (3.14)$$

$$k = 1, 2; \quad j = 1, \dots, d, \quad [a_i^k, a_j^{k+}] = \delta_{i,j},$$

где ω_k - частота осциллятора, которая пока неизвестна. Подставляя (3.14) в (3.9) и проводя упорядочивание по операторам рождения и уничтожения, получаем

$$H = H_0 + \varepsilon_0(E_r) + H_I. \quad (3.15)$$

Здесь H_0 является гамильтонианом двух несвязанных осцилляторов

$$H_0 = \omega_1(a_1^+(1) \cdot a_1(1)) + \omega_2(a_2^+(2) \cdot a_2(2)), \quad (3.16)$$

а $\varepsilon_0(E_r)$ - энергия основного состояния в нулевом приближении ОП [69, 70], которая имеет вид

$$\begin{aligned}
\varepsilon_0(E_r) &= \frac{d}{4}(\omega_1 + \omega_2) - \frac{2dE_r}{\omega_1} - \frac{2dE_r}{\omega_2} - 4(\omega_1\omega_2)^{d/2} * \\
&* e^{-\beta_1\omega_1 - \beta_2\omega_2} \cdot \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \left[\frac{\lambda_+(\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 + 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2}} + \right. \\
&+ \left. \frac{\lambda_+(\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 - 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2}} \right] - 4(\omega_1\omega_2)^{d/2} \cdot e^{-\beta_1\omega_1 - \beta_2\omega_2} * \\
&* \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \left[\frac{\lambda_-(\beta_1 + \beta_2) \cdot (R + (\beta_1 - \beta_2))}{\left((\beta_1 + \beta_2)^2 + 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2 \right)^{3/2}} - \right. \\
&- \left. \frac{\lambda_-(\beta_1 + \beta_2) \cdot (R - (\beta_1 - \beta_2))}{\left((\beta_1 + \beta_2)^2 - 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2 \right)^{3/2}} \right]. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

Гамильтониан взаимодействия H_I также представляется в нормальной форме по операторам рождения и уничтожения, причем он не содержит квадратичных слагаемых по каноническим переменным

$$\begin{aligned}
H_I &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\pi \tau}} e^{-\tau^2} \int \left(\frac{d\eta_1}{\sqrt{\pi}} \right)^d \int \left(\frac{d\eta_2}{\sqrt{\pi}} \right)^d * \\
&* e^{-(SR)^2 \cdot t - \eta_1^2 - \eta_2^2} \cdot \left\{ \exp \left\{ -\eta_1^2 \cdot \frac{\mu_+}{\omega_1} - \eta_2^2 \cdot \frac{\mu_-}{\omega_2} \right\} * \right. \\
&* F(2i\sqrt{\mu_+}(\eta_1 q_1), 2i\sqrt{\mu_-}(\eta_2 q_2)) + \\
&+ \left. \exp \left\{ -\eta_1^2 \cdot \frac{\mu_-}{\omega_1} - \eta_2^2 \cdot \frac{\mu_+}{\omega_2} \right\} \cdot F(2i\sqrt{\mu_-}(\eta_1 q_1), 2i\sqrt{\mu_+}(\eta_2 q_2)) \right\} \Big|_{\beta=0} \tag{3.18}
\end{aligned}$$

где введены обозначения

$$F(y_1, y_2) =: e_2^{-y_1} :: e_2^{-y_2} : + : e_2^{-y_2} : (1 + \frac{1}{2} : y_1^2 :) + : e_2^{-y_1} : (1 + \frac{1}{2} : y_2^2 :)$$

$$\mu_{\pm} = \beta \pm 2SRt + 2i\sqrt{t}\tau$$

Здесь $*$: является символом нормального упорядочивания. Некоторые детали представления гамильтониана в нормальной форме приведены в Приложении.

Вклад гамильтониана взаимодействия H_I рассматривается как малое возмущение. В КТП, выражая канонические переменные через операторы рождения и уничтожения и представляя гамильтониан взаимодействия в нормальной форме, требование отсутствия в гамильтониане взаимодействия полевых операторов второй степени, по существу, эквивалентно перенормировке константы связи и волновой функции [73-75]. Более того, такая процедура позволяет учесть основной квантовый вклад через перенормировку массы и энергию вакуума. Другими словами, все квадратичные формы полностью включены в гамильтониан свободного осциллятора. Данное требование позволяет сформулировать условие, согласно методу ОП

$$\frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_1} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0(E)}{\partial \omega_2} = 0, \quad (3.19)$$

для нахождения частоты ω_1 и ω_2 несвязанных осцилляторов, которые определяют основной квантовый вклад. Учитывая (3.17), из уравнений (3.13) и (3.19) мы можем вычислить энергию внутренней системы E_r как функцию параметра R . Так как нас интересует основное состояние, в данной работе мы не будем рассматривать радиальные возбуждения. В рамках метода ОП для различных потенциалов [69, 70] неоднократно проверялось, что поправка первого порядка, связанная с гамильтонианом взаимодействия, тождественно равна нулю, а поправка второго порядка меньше одного процента. Поэтому мы ограничимся рассмотрением только нулевого приближения.

При дальнейших вычислениях проводим замену переменных

$$\beta_1 = \frac{t+s}{\sqrt{2}}; \quad \beta_2 = \frac{t-s}{\sqrt{2}}. \quad (3.20)$$

После некоторых упрощений из (3.17) имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(E_r) = & \frac{d}{2} \omega_+ - \frac{2dE_r \omega_+}{\omega_+^2 - \omega_-^2} - 4\lambda_+ (\omega_+^2 - \omega_-^2)^{d/2} Q_+(R) + \\ & + 4\lambda_- (\omega_+^2 - \omega_-^2)^{d/2} \frac{\partial}{\partial R} Q_-(R). \end{aligned} \quad (3.21)$$

Здесь использованы следующие обозначения

$$\omega_{\pm} = \frac{\omega_1 \pm \omega_2}{2}; \quad Q_{\pm}(R) = T_{+}(R) \pm T_{-}(R), \quad (3.22)$$

где

$$T_{\pm}(R) = \int_0^{\infty} \frac{dt \cdot t^d}{\Gamma^2\left(\frac{d}{2}\right)} \cdot \int_{-1}^1 dx \frac{(1-x^2)^{\frac{d}{2}-1} e^{-\omega_+ t - \omega_- t x}}{\sqrt{t^2 \pm 2R \cdot x + R^2}}. \quad (3.23)$$

Если будем ограничиваться только первым порядком параметра u , то при $R=0$ и $R=\infty$ из (3.19) имеем $\omega_1 = \omega_2$, т.е. в этом приближении $\omega = 0$. Поэтому при вычислении интеграла, представленного в (3.23), проведем разложение по степеням ω и будем ограничиваться низшими порядками. Рассмотрим основное состояние, т.е. $m=0$, тогда из (3.10) имеем $d=2$. Исходя из этих предположений, после простых вычислений, учитывая (3.23), получаем

$$Q_{+}(R) = \frac{2R^2}{\Omega^2} \left(2 \frac{1-e^{-\Omega}}{\Omega} - e^{-\Omega} \right) + O(\omega_-^2); \quad (3.24)$$

$$Q_{-}(R) = \frac{2\omega_- R^3}{\Omega^2} \left[8 \frac{1-e^{-\Omega}}{\Omega^3} \cdot \frac{8e^{-\Omega}}{\Omega^2} - \frac{4e^{-\Omega}}{\Omega} - e^{-\Omega} \right].$$

где $\Omega = \omega_+ R$. Подставляя (3.24) в (3.21) а также из уравнений (3.13) и (3.19) при $R \ll l$ для энергетического спектра внутренней системы имеем

$$E_r(R) = \frac{\omega_+^2}{4} - \frac{\omega_0 \cdot \omega_+}{2} \left(2 \frac{1-e^{\omega_+ R}}{\omega_+ R} - e^{-\omega_+ R} \right) + \frac{16}{27} \omega_0^2 \lambda_-^2 (3 \cos^2 \alpha - 1) \cdot \left(1 - \frac{29}{3} \omega_0^2 R^2 \right). \quad (3.25)$$

Здесь $\omega_0 = 4\lambda_+$, а ω_+ определяются из уравнений

$$\omega_+ - \omega_0(1 + \omega_+ R)e^{-\omega_+ R} = 0 \quad (3.26)$$

Таким образом, при малых R получим потенциал запираия электронов в КТ.

Для этого проводим усреднение по волновой функции внутренней системы. Учитывая (3.2) и (3.4) и проводя простые упрощения из (3.1) имеем

$$\left[\frac{1}{2} \bar{P}_R^2 + \frac{\hbar^2}{8} \omega_c^2 \rho_R^2 + \frac{\hbar}{a^* \sqrt{2m^*}} \frac{Z_1 Z_2}{r} - E + \frac{\hbar \omega_c}{2} L_{\phi R} + V_c(R) \right] \chi(\vec{R}) = 0, \quad (3.27)$$

где E – энергетический спектр исходной системы, а величина $V_c(R)$ – искомый потенциал удержания:

$$V_c(R) = E_r(R) + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\omega_+} \frac{\partial}{\partial R} \omega_+ \right)^2. \quad (3.28)$$

Первое слагаемое в (3.28), $E_r(R)$, – потенциал в (3.25), создаваемый электростатическим полем заряда изображений, а второе слагаемое связано с относительным движением частиц и определяется усреднением полного гамильтониана (3.1) по волновой функции $\Phi(R, \vec{r})$ внутренней системы. Очевидно, что полученный потенциал удержания содержит различные решения в зависимости от характера кулоновского взаимодействия и величины магнитного поля. Мы рассмотрим сферически – симметричное решение $\omega = 0$, т.е. $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$. В этом случае имеем

$$V_c(R) = \frac{\omega_2}{8} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial R} \right)^2 - \frac{\lambda \omega}{2} (Z_1 Z_3 + Z_2 Z_3) \left[2 \frac{1 - e^{-SR\omega}}{SR\omega} - e^{-SR\omega} \right], \quad (3.29)$$

где ω определяется уравнением

$$\omega - 2\lambda(Z_1 Z_3 + Z_2 Z_3)(1 + SR\omega)e^{-SR\omega} = 0. \quad (3.30)$$

Таким образом, в нашей модели для двухэлектронной квантовой точки потенциал удержания отличается от потенциала параболического конфайнмента и определяется выражением (3.29) и уравнением (3.30).

Рассматривая предел $R \ll l$ и разлагая потенциал V_c по переменной R , получаем

$$\begin{aligned} V_c(R) = & -\frac{\hbar \omega_0}{8} + \hbar^2 \left(\frac{1}{24} + \frac{S^2}{4} \right) S^2 \omega_0^2 r^2 - \\ & - \left(\frac{1}{48} + \frac{S^2}{4} \right) \hbar^{3/2} \omega_0^{3/2} R^3 + \hbar^3 \frac{\omega_0^3 S^4}{60} R^4 + O(R^5), \end{aligned} \quad (3.31)$$

где

$$\omega_0 = \left(4Z_3 \frac{S\sqrt{2\hbar}}{a^* \sqrt{m^*}} \right), \quad S = \sqrt{\frac{m_3}{m_t}}. \quad (3.32)$$

Ограничиваясь только второй степенью по R в (3.31) получаем потенциал параболического конфайнмента с частотой ω_0 . Из (3.29), (3.31), (3.32) следует, что свойства потенциала зависят от заряда изображений и эффективной массы электронов. Данная зависимость включается в конечное выражение для энергетического спектра через параметры ω_0 и S . Если масса заряда изображений создается всеми электронами окружающей среды или тяжелыми ионами, то параметр $S \approx 1$ (для $m_1 = m_2 = m_3$, $S = 1/\sqrt{3}$). Характеристическая длина квантовой точки (ямы) [13], образованной на границе двух сред,

$$l_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega_0}} = \frac{a^*}{4Z_3 S \sqrt{2}}, \quad (3.33)$$

также зависит от заряда изображений.

Используя конкретные значения параметров для случая квантовой точки, например $Z_1 = Z_2 = Z_3 = 1$ и $m_1 = m_2 = m_3$, можно определить зависимость уравнения (3.30). Соответственно, это позволяет определить зависимость потенциала,

$$E_r(R) = \frac{\omega^2}{8} - \lambda\omega \left[2 \frac{1 - e^{-SR\omega}}{SR\omega} - e^{-SR\omega} \right], \quad (3.34)$$

создаваемого электростатическим полем заряда изображений, а также потенциала

$$V_{rel} = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\omega} \frac{\partial \omega}{\partial R} \right)^2, \quad (3.35)$$

связанного с относительным движением электронов, от параметра R . Из рисунка 2 видно, что при возрастании R частота осциллятора ω плавно уменьшается от 4,619 до 0. Потенциал V_{rel} в начале координат равен нулю, на малых расстояниях он возрастает, а затем при дальнейшем возрастании R быстро убывает (рисунок 3). Из рисунка 4 видно, что потенциал $E_r(R)$ при $R=0$ является конечным, т.е. сингулярность отсутствует, а при $R=\infty$ убывает как кулоновский. Величина потенциала V_{rel} на порядок меньше абсолютного значения $E_r(R)$. Таким образом, основной вклад в потенциал удержания определяется взаимодействием электронов в электростатическом поле заряда изображений.

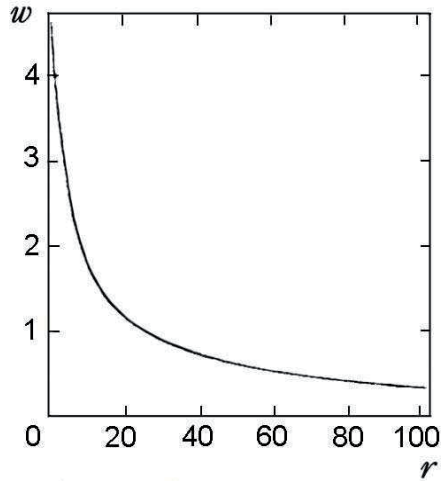


Рисунок 2 - Зависимость частоты осциллятора от расстояния между двумя электронами

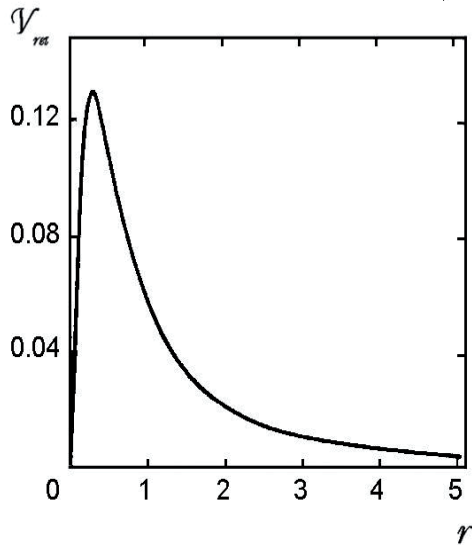


Рисунок 3 - Зависимость потенциала, созданного относительным движением электронов от расстояния между двумя электронами

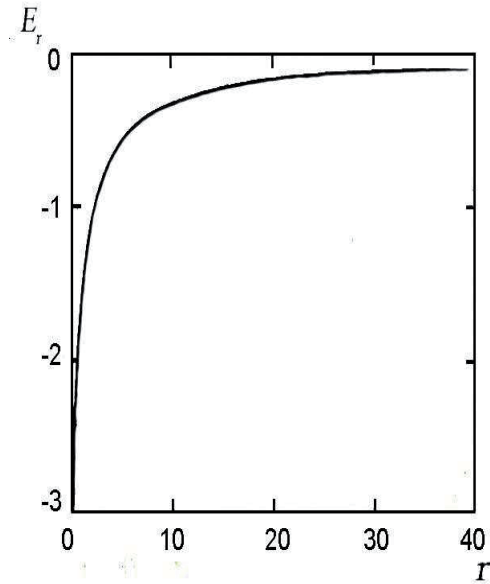


Рисунок 4 - Зависимость потенциала, созданного электростатическим полем заряда изображений от расстояния между двумя электронами

3.3 Определение энергетического спектра двухэлектронной квантовой точки с параболическим потенциалом

Теперь в рамках метода ОП рассмотрим вычисления энергетического спектра с потенциалом $V_c(R)$ (3.31). Для иллюстрации рассмотрим случай $z = 0$, т.е. двумерную систему, которая может служить моделью квантовой точки. Согласно (3.27), гамильтониан относительного движения двухэлектронной системы имеет вид

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} \right] + \frac{\hbar^2}{2} \Omega^2 \rho^2 + \frac{l_0}{a^*} \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{\rho} - \\
 & - \hbar^2 \sqrt{\hbar W} \rho^3 + \hbar^3 G \rho^4 - \frac{\hbar \omega_0}{8} + \frac{1}{2} m \hbar \omega_c,
 \end{aligned}
 \tag{3.36}$$

где $m=0, \pm 1, \dots$ – магнитное квантовое число и

$$\omega_r^2 = \frac{\lambda^2 \omega_0^2}{12}, \quad W = \frac{\lambda^3}{48} \omega_0^2 \sqrt{\omega_0},$$

$$\Omega = \sqrt{\omega_r^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}, \quad G = \frac{\lambda^4 \omega_0^3}{160}, \quad k = \frac{l_0}{a^*}. \quad (3.37)$$

Уравнение Шредингера для гамильтониана (3.36) принимает вид

$$\left[\frac{1}{2} P_\rho^2 + \frac{\hbar^2}{2} \Omega^2 \rho^2 + k \frac{\sqrt{\hbar \omega_0}}{\rho} - \hbar^{3/2} W \rho^3 + \hbar^3 G \rho^4 \right] \psi_m = U_m \psi_m. \quad (3.38)$$

Здесь U_m – энергетический параметр,

$$U_m = E_m + \frac{\hbar \omega_0}{8} - \frac{m}{2} \hbar \omega_c. \quad (3.39)$$

Прежде всего, рассмотрим чисто параболический потенциал, т.е. $W=0$ и $G=0$. В этом случае для энергетического спектра получим:

$$E_m = \hbar \omega_0 \left\{ -\frac{1}{8} + t \frac{m}{2} + x^2 (1 + |m|) \cdot \sqrt{\frac{S^2}{2} \left(\frac{1}{6} + S^2 \right) + \frac{t^2}{4}} + \frac{3x}{2} k \left[\frac{S^2}{2} \left(\frac{1}{6} + S^2 \right) + \frac{t^2}{4} \right]^{1/4} \right\}^*$$

$$* \frac{\Gamma(|m| + 1/2)}{\Gamma(1 + |m|)} + \frac{t}{4} \left[1 - (-1)^m \right] \frac{m^*}{m_e} g^*. \quad (3.40)$$

Параметр x определяется из уравнения

$$x^4 + x^3 k \left[\frac{S^2}{2} \left(\frac{1}{6} + S^2 \right) + \frac{t^2}{4} \right]^{1/4} \cdot \frac{\Gamma(|m| + 1/2)}{\Gamma(2 + |m|)} - 1 = 0. \quad (3.41)$$

Здесь $t = \omega_c / \omega_0$ – относительная напряженность магнитного поля, а g^* является эффективным фактором Ланде. В выражение (3.40) также включен вклад эффекта Зеемана, связанный со спиновым взаимодействием двух электронов в магнитном поле. Выражение (3.40) и (3.41) дают возможность определить

основное состояние квантовой точки как функцию ее размера $k = l_0/a^*$ и относительной напряженности магнитного поля.

Перейдем к вычислению энергетического спектра гамильтониана (3.38). В этом случае замена переменных представляется следующим образом:

$$\rho = q^{2\alpha}, \quad \psi_m = q^{2\alpha|m|} \Phi_m(q), \quad (3.42)$$

где параметр α связан с поведением волновой функции на больших расстояниях. Потенциал содержит ангармонические члены, и при определении параметра α будем следовать результатам работы [76]. Для больших ρ асимптотика волновой функции определяется ангармоническим членом $G\rho^4$, при этом $\alpha = 1/3$. При малых значениях G и W истинная волновая функция ближе к гауссовской волновой функции, поэтому $\alpha = 1/2$. Этот предел соответствует потенциалу параболического конфайнмента. Таким образом, параметр α , рассматриваемый в качестве вариационного параметра при минимизации энергии основного состояния в нулевом приближении [76], может изменяться в интервале $1/3 \leq \alpha \leq 1/2$. На рисунке 5 представлена зависимость параметра α от напряженности магнитного поля $t = \omega_c/\omega_0$ для состояний $m = -1, -2, -3, \dots$. Результаты анализа показывают, что для состояний с небольшим абсолютным значением магнитного квантового числа m параметр $\alpha < 1/2$. С ростом величины магнитного поля параметр α асимптотически стремится к пределу $\alpha = 1/2$, соответствующему гауссовской волновой функции. Отметим, что в осцилляторном представлении, благодаря введению параметра α , удается избежать проблемы суммирования рядов теории возмущений, т.е. успешно обойти проблему феномена Дайсона [77].

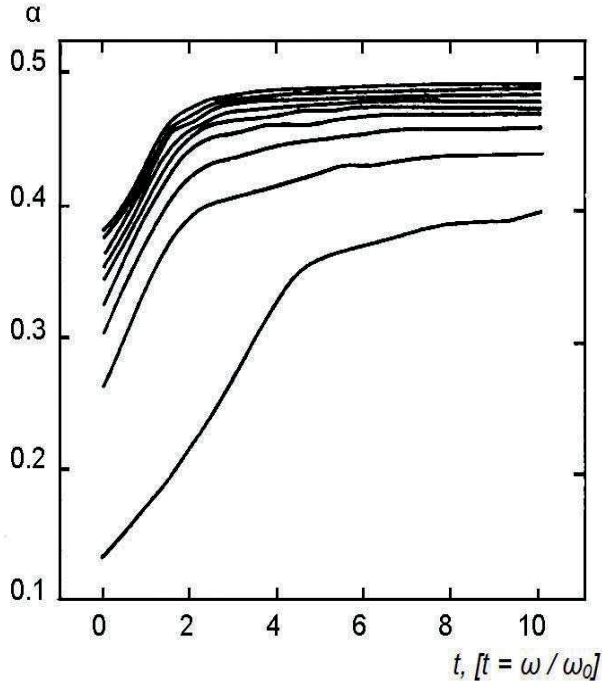


Рисунок 5 - Зависимость параметра α от относительной напряженности внешнего магнитного поля t для различных значений магнитного квантового числа m .
Нижний уровень соответствует $m=-1$, следующий $m=-2$ и т.д.

После некоторых преобразований уравнения (3.38) получим модифицированное уравнение Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right] + 4k\sqrt{\hbar\omega_0} \alpha^2 q^{2(\alpha-1)} + 2\alpha^2 \hbar^2 \Omega^2 q^{2(4\alpha-1)} - \right. \\ \left. - 4\hbar^{3/2} \alpha^2 W q^{2(5\alpha-1)} + 4\alpha^2 \hbar^3 G q^{2(6\alpha-1)} - 4\alpha^2 U_m q^{2(2\alpha-1)} \right\} \cdot \Phi_m(q^2) = 0, \quad (3.43)$$

где $d = 2 + 4\alpha|m|$. Энергия основного состояния в нулевом приближении равна

$$\begin{aligned}
\varepsilon_0(U_m) = & \frac{d\omega\hbar}{4} - \frac{4\alpha^2 U_m}{(\omega\hbar)^{2\alpha-1}} \frac{\Gamma(d/2 + 2\alpha - 1)}{\Gamma(d/2)} + \\
& - \frac{l_0}{a^*} \frac{4\sqrt{\hbar\omega_0}\alpha^2}{(\omega\hbar)^{\alpha-1}} \frac{\Gamma(d/2) + \alpha - 1}{\Gamma(d/2)} - \frac{4\hbar^{3/2}\alpha^2 W}{(\omega\hbar)^{5\alpha-1}} \frac{\Gamma(d/2) + 5\alpha - 1}{\Gamma(d/2)} + \\
& + \frac{2\alpha^2 \hbar^2 \Omega^2}{(\omega\hbar)^{4\alpha-1}} \frac{\Gamma(d/2 + 4\alpha - 1)}{\Gamma(d/2)} + \frac{4\alpha^2 \hbar^3 G}{(\omega\hbar)^{6\alpha-1}} \frac{\Gamma(d/2 + 6\alpha - 1)}{\Gamma(d/2)},
\end{aligned} \tag{3.44}$$

а для гамильтониана взаимодействия имеем

$$\begin{aligned}
H_I = & \int_0^\infty d\tau \int_{-\infty}^\infty \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+\tau)} : e_2^{-2i\sqrt{\lambda\hbar\omega}(q\eta)} : \left[\frac{4k\sqrt{\hbar\omega_0}\alpha^2}{(\omega\hbar)^{\alpha-1}} \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha)} - \right. \\
& \left. - \frac{4\hbar^2\sqrt{\hbar}\alpha^2 W}{(\omega\hbar)^{5\alpha-1}} \frac{\tau^{-5\alpha}}{\Gamma(1-5\alpha)} \right] - \frac{4U_m\alpha^2}{(\omega\hbar)^{2\alpha-1}} \frac{\tau^{-2\alpha}}{\Gamma(1-2\alpha)} + \\
& + \left. \frac{2\alpha^2\hbar^2\Omega^2}{(\omega\hbar)^{4\alpha-1}} \frac{\tau^{-4\alpha}}{\Gamma(1-4\alpha)} + \frac{4\alpha^2\hbar^3 G}{(\omega\hbar)^{6\alpha-1}} \frac{\tau^{-6\alpha}}{\Gamma(1-6\alpha)} \right].
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Из уравнения

$$\frac{\partial \varepsilon_0(U_m)}{\partial \omega} = 0 \tag{3.46}$$

определяем параметр ω как функцию энергии U_m , а также и другие параметры потенциала.

Учитывая (3.42), (3.44) и используя обозначение (3.37), после необходимых преобразований для энергетического спектра получаем

$$\begin{aligned}
\frac{E_m}{\hbar\omega_0} = \min_{\alpha} & \left\{ -\frac{1}{8} + \frac{tm}{2} + \frac{tm^*}{4m_e} \left[1 - (-1)^m \right] \mathcal{G}^* + \frac{z^2}{4\alpha} \frac{\sqrt{\Gamma(2+2\alpha|m|)\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)}}{\Gamma(2\alpha+2\alpha|m|)} \right\} * \\
& * \sqrt{\frac{S^2}{3} + t^2} + k \frac{3z\sqrt{\alpha}}{2} \frac{\Gamma(\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2\alpha+2\alpha|m|)} \cdot \left[\frac{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2+2\alpha|m|)} \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right) \right]^{1/4} + \\
& + \frac{S^3}{96z^3\alpha^{3/2}} \frac{\Gamma(5\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2+2\alpha|m|)} \times \left[\frac{\Gamma(2+2\alpha|m|)}{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)} \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right)^{-1} \right]^{3/4} - \\
& - \frac{S^4}{160z^4\alpha^2} \frac{\Gamma(6\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2+2\alpha|m|)} \frac{\Gamma(2+2\alpha|m|)}{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)} \times \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right)^{-1} \left. \right\}. \tag{3.47}
\end{aligned}$$

параметр z определяется из уравнения

$$\begin{aligned}
z^4 + 4k\alpha^{3/2}z^3 & \frac{\Gamma(\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2+2\alpha|m|)} \cdot \left[\frac{\Gamma(2+2\alpha|m|)}{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)} \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right)^{-1} \right]^{-1/4} - \\
- 1 + \frac{S^3}{4z\sqrt{\alpha}} & \frac{\Gamma(5\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2+2\alpha|m|)} \cdot \left[\frac{\Gamma(2+2\alpha|m|)}{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)} \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right)^{-1} \right]^{-5/4} - \\
- \frac{S^4}{z^2 10\alpha} & \frac{\Gamma(6\alpha+2\alpha|m|)}{\Gamma(2\alpha+2\alpha|m|)} \cdot \left[\frac{\Gamma(2+2\alpha|m|)}{\Gamma(4\alpha+2\alpha|m|)} \left(\frac{S^2}{3} + t^2 \right)^{-1} \right]^{3/2} = 0. \tag{3.48}
\end{aligned}$$

Очевидно, что энергетический спектр (3.47) отличается от энергетического спектра (3.40), обусловленного параболическим характером потенциала удержания. Из рисунков 6 и 7 следует, что зависимости энергетического спектра от размера квантовой точки $k = l_0/a^*$ и относительной напряженности магнитного поля $t = \omega_c/\omega_0$ для параболического и квазипараболического потенциала являются аналогичными. Однако в слабых магнитных полях

синглет-триплетные переходы для квазипараболического потенциала происходят при более высоких значениях магнитного поля (см. рисунок 6 и 7). Мы ожидаем, что в слабых магнитных полях потенциал удержания будет отличаться от потенциала параболического конфайнмента. В то же время в сильных магнитных полях, $\omega_c \gg \omega_0$, т.е. в пределе $t \rightarrow \infty$, из анализа выражений (3.47) и (3.48) следует, что вклад потенциала (3.29), связанного с квазипараболической структурой, менее заметен ($z \sim 1$). Таким образом, в сильных магнитных полях гипотеза о параболическом характере потенциала удержания для двухэлектронной системы является вполне оправданной. В наших вычислениях мы использовали следующие характерные GaAs величины: эффективная масса $m^* = 0.067m_e$ и $g^* = -0.44$.

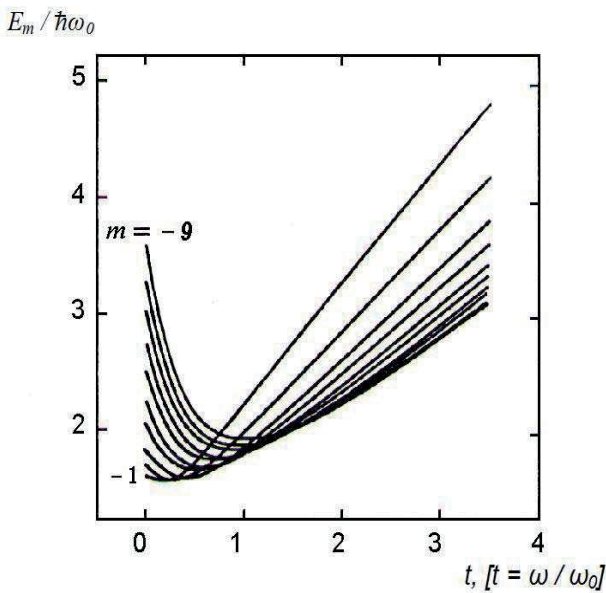


Рисунок 6 - Энергетические спектры гамильтониана относительного движения с учетом эффекта Зеемана в зависимости от относительной напряженности внешнего магнитного поля t для параболического потенциала, рассчитанные соответственно по формуле (3.40)

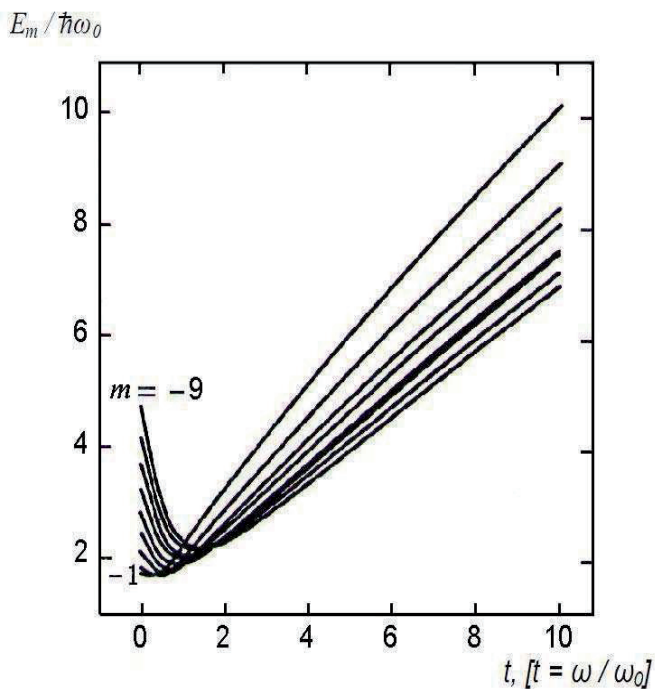


Рисунок 11 - Энергетические спектры гамильтониана относительного движения с учетом эффекта Зеемана в зависимости от относительной напряженности внешнего магнитного поля t для квазипараболического потенциала, рассчитанные соответственно по формуле (3.47)

3.4 Краткие выводы

Определен потенциал удержания, который полностью обусловлен взаимодействием электронов в поле заряда изображений. Результаты анализа позволяют утверждать, что потенциал удержания в КТ может заметно отличаться от параболического типа, особенно при малых значениях магнитного поля, что может быть проверено при анализе спиновых осцилляций основного состояния двухэлектронной системы в магнитных полях. Таким образом, установлено, что при сильных магнитных полях гипотеза о параболическом характере потенциала удержания для двухэлектронной системы является вполне оправданной.

Определен энергетический спектр трехтельной системы, в рамках адиабатического приближения, и установлено, что в адиабатических приближениях система разделяется на две части: внешние и внутренние системы. Энергетический спектр внутренней системы обычно называется термами. Эти термы для внешних систем рассматриваются как потенциал взаимодействия. Исходя из этого, определен потенциал взаимодействия электронов в КТ.

Параметр u , который связан с зарядом изображений, считаем малым и проводим разложение по степеням малого параметра, определяем гамильтониан относительного движения двухэлектронной системы (3.36). Определен потенциал параболического конфайнмента. Установлено, что потенциал зависит от размера КТ, при возрастании размера КТ параболическая аппроксимация потенциала заперения электронов в КТ не полностью отражает динамику формирования КТ и требуется учет ангармонических поправок. Таким образом, введена ангармоническая поправка к потенциалу параболического конфайнмента для двухэлектронной КТ.

Используя адиабатическое приближение в рамках осцилляторного представления, аналитически вычислен энергетический спектр квантовой точки при различных значениях магнитного поля, а также с учетом ангармонической поправки. Показана зависимость энергетического спектра для различных параметров КТ.

Рассмотрены энергетические спектры гамильтониана относительного движения в зависимости от t относительной напряженности внешнего магнитного поля для параболического и квазипараболического потенциала. В слабых магнитных полях синглет-триплетные переходы для квазипараболического потенциала происходят при более высоких значениях магнитного поля. Поэтому при сильных магнитных полях в пределе $t \rightarrow \infty$, вклад потенциала, связанного с квазипараболической структурой, менее заметен.

ГЛАВА 4 ДИПОЛЬНОЕ И СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

4.1 Постановка задачи

В предыдущем разделе уже говорилось, что учет многослойности нанокристаллических твердотельных структур при условии, что массы зарядов изображений, которые описывают влияние каждого слоя для формирования нанокристаллических структур, больше, чем масса электрона, находящегося в квантовой яме, приводит к появлению дополнительного взаимодействия: кулоновского взаимодействия суммарного заряда изображений с каждым электроном в квантовой яме и дипольного взаимодействия между различными слоями.

Весьма важным при этом является возможность учета штарковского расщепления энергетического уровня электронов в КТ [78-82]. Штарк эффект, расщепление спектральных линий атомов, молекул и других квантовых систем в электрическом поле, является результатом сдвига и расщепления на подуровни уровней энергии под действием электрического поля E .

Знание механизма туннелирования электронов в КТ открывает возможность использования КТ в качестве элементной базы для новых технологий. Поэтому изучение механизма туннелирования или Штарковского расщепления энергетического уровня электронов в КТ представляет не только теоретический интерес, но и имеет большое практическое значение. По существу, определение Штарковского расщепления энергетического уровня электронов в КТ эквивалентно определению потенциала дипольного взаимодействия. Поэтому выяснение механизма возникновения потенциала дипольного взаимодействия электронов в КТ является важнейшей проблемой при исследовании механизма формирования КТ. Туннельный эффект — квантовое явление проникновения микрочастицы из одной классически доступной области движения в другую, отделённую от первой потенциальным барьером. Явление туннелирование позволяет объяснить многие экспериментально наблюдавшиеся процессы. Найденное решение позволяет понять большой круг явлений и применяется для описания процессов, происходящих при вылете частицы из ядра, - основы атомной науки и техники.

С другой стороны, в последние годы интенсивно развивается изучающая явления в низкоразмерных системах так называемая «спинтроника» [83]. Спинтроника – это область квантовой электроники, в которой для физического представления информации наряду с зарядом используется спин частица, связанная с наличием у них собственного механического момента. Электроны в атомах обладают как спиновыми, так и зарядовыми степенями свободы. В нерелятивистской квантовой механике эти степени свободы не зависят друг от друга, и поэтому атомные уровни энергии многократно вырождены. Релятивистские эффекты приводят к спин-орбитальному взаимодействию (СОВ), в результате чего вырождение частично снимается, и у атомных спектров появляется так называемая тонкая структура. СОВ, взаимодействие частиц, зависящее от величин и взаимной ориентации их орбитального и

спиновых моментов количества движения и приводящее к тонкому расщеплению уровней энергии системы.

Возможность контролировать и управлять свойствами квантовых точек привлекает к ним огромный интерес, так как они могут быть использованы, например, в качестве новой элементной базы для нанoeлектроники [15]. Простейшим примером таких систем, в котором можно проследить существенные особенности и более сложные комплексы, является двухэлектронная квантовая точка. Основной проблемой в применении низкоразмерных электронных систем в современной полупроводниковой электронике является управление движением электронов в наноструктурах. Это управление осуществляется воздействием на электрический заряд электрона с помощью внешнего электрического поля или воздействием на спин электрона с помощью внешнего магнитного поля. Если поместить электроны в магнитное поле, то их спины выстроятся вдоль направления поля. Согласно принципу Паули, на одном энергетическом уровне не может одновременно находиться два одинаковых электрона, один электрон переходит на лежащий выше энергетический уровень или выходит из квантовой ямы или квантовой точки.

С помощью этого взаимодействия можно управлять расположением электрона в КТ, т.е. движение электронов в КТ управляется с помощью воздействия на спин электрона. На основе этого процесса можно осуществить электронный переход, в частности одноэлектронный переход в наноструктурах. В развитии элементной базы с освоением нанотехнологии, когда размеры активных областей электронных структур будут сравнимы с атомными размерами и длиной свободного пробега электрона. Поэтому важную роль в нанoeлектронике играет квантовая электроника, основанная на одноэлектронных эффектах. В одноэлектронных переходах реализуется идея «один электрон - один бит информации». Дальнейшее развитие этой идеи - спинтроника, в которой элементарным носителем информации является спин электрона. Возникает естественный вопрос, при каких условиях взаимодействия между электронами в низкоразмерных системах (наноструктурах), в частности КТ, определяются рашба – потенциалом [83-86], т.е. при каких условиях напряженность спин – орбитального взаимодействия становится доминирующей над кулоновским взаимодействием между электронами в КТ, которое вызвано зарядом электрона.

В данной главе определяем, при каких условиях взаимодействия между электронами в КТ доминируют спин - орбитальным взаимодействием.

4.2 Определение энергетического спектра с учетом дипольного взаимодействия

Приступим к определению энергетического спектра с учетом дипольного взаимодействия. Согласно (2.40) и (3.25), для полного гамильтониана двухэлектронной квантовой точки из (3.1) получаем:

$$\begin{aligned}
H = & -\frac{\hbar}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right] + \frac{\hbar^2}{2} \Omega^2 R^2 + \\
& + \frac{k\sqrt{\hbar\omega_0}}{R} - \frac{\hbar\omega_0}{8} + \frac{1}{2} m\hbar\omega_c - \frac{9\hbar\xi^2}{8c^2} R^2.
\end{aligned} \tag{4.1}$$

где ξ - напряженность дипольного электрического поля, созданная зарядом изображений, определяется стандартным образом и в атомной системе единиц равна [87]

$$\xi = \frac{1}{R^2}, \tag{4.2}$$

также использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega_0}}; & \quad k = \frac{l_0}{a}; \\
\Omega = \sqrt{\omega_r^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}; & \quad \omega_r = \frac{\lambda\omega_0}{2\sqrt{3}}.
\end{aligned} \tag{4.3}$$

l_0 – характеристическая длина квантовой точки [13].

В работах [4-7] более детально рассмотрена двухэлектронная КТ в двумере. Также в [7] учитывали вклад трехмера как малое возмущение. В данном пункте будем ограничиваться рассмотрением только взаимодействия по третьему направлению. Мы предполагаем, что по этому направлению внешнее магнитное поле не действует, а осуществляется только дипольное взаимодействие [88-90]. Тогда из (4.1) имеем:

$$H_z = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{k\sqrt{\hbar\omega_0}}{z} + \frac{\hbar^2}{2} \omega_z^2 z^2 - \frac{9\hbar^2 \xi^2}{8c^2} z^2. \tag{4.4}$$

Теперь приступим к определению собственного значения гамильтониана (4.4) в рамках метода ОП. После некоторых стандартных вычислений, которые изложены в предыдущем пункте, для энергетического спектра из (4.4) имеем:

$$E_z = \min_{\alpha} \left\{ \left(T^2 + \frac{3T}{2\hbar^2} \right) \cdot \frac{4\alpha^2 k^2 \omega_0}{\hbar} \cdot \frac{\Gamma^2(\alpha)}{\Gamma(2\alpha)} \right\}. \quad (4.5)$$

Параметр T определяется из уравнения:

$$T^4 + T^3 - \left(1 - \left(\frac{\xi}{\xi_0}\right)^2\right) \cdot \frac{\lambda^2 \hbar^6}{3 \cdot 256 \cdot \alpha^6 k^4} \cdot \frac{\Gamma(4\alpha)}{\Gamma^4(\alpha)} = 0, \quad (4.6)$$

здесь использовано обозначение

$$\xi_0 = \frac{\lambda S \omega_0}{3\sqrt{3}}. \quad (4.7)$$

Решение уравнения (4.7) определяется численным образом при конкретных значениях параметров λ , k и ω , как функции от ξ -напряженности дипольного электрического поля. Напряженность дипольного электрического поля определяется в единицах ξ_0 , т.е. в этих единицах напряженность поля $\eta = \frac{\xi}{\xi_0}$.

Уравнение (4.7) имеет четыре независимых решения. Мы выбираем только те решения, которые удовлетворяют условию:

$$ReT \geq 0$$

Существует такое значение параметра $\eta=1$, при котором решения T_j уходят в комплексную плоскость. При $\eta \leq 1$ решения T_j вещественны, а при $\eta \geq 1$ у T_j возникает мнимая часть, которая позволяет рассчитать не только спектр, но и ширину уровней, которая определяет вероятность туннельного перехода. Зависимость энергетического спектра и ширины уровней от параметра η представлены на рисунках 8 и 9 для различных значений параметра $k=1, 2, 3$, соответственно. Из рисунка 8 видно, что для различных размеров КТ, т.е. для различных значений параметра k , энергетический спектр с возрастанием параметра напряженности η уменьшается и со значения $\eta=1$ начинается возрастание, т.е. постепенно от дискретного спектра осуществляется переход к непрерывному спектру. Мнимая часть энергетического спектра обычно определяет ширину распада или вероятность перехода к непрерывному спектру. Из уравнения (4.6) мы получаем мнимую добавку к энергетическому спектру только при значении параметра $\eta \geq 1$. При значении параметра $\eta \leq 1$ определение мнимой части энергетического спектра более подробно изложено в учебнике [91]. Эти результаты мы использовали для определения ширины распада при значении параметра $\eta \leq 1$. Результаты наших вычислений для

ширины распада представлены на рисунке 13. Из рисунка 13 видно, что при малых значениях параметра k вероятность туннельного перехода электронов в КТ становится больше. Это поведение справедливо только для потенциала параболического конфайнмента.

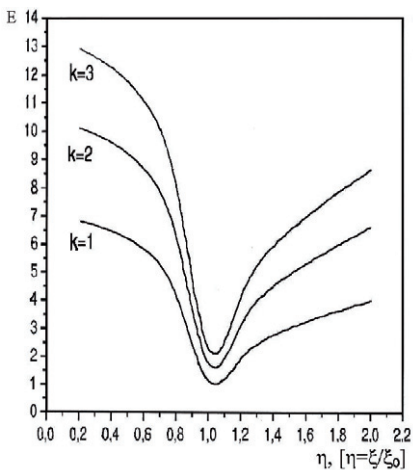


Рисунок 8 - Зависимость энергетического спектра от параметра η напряженности поля

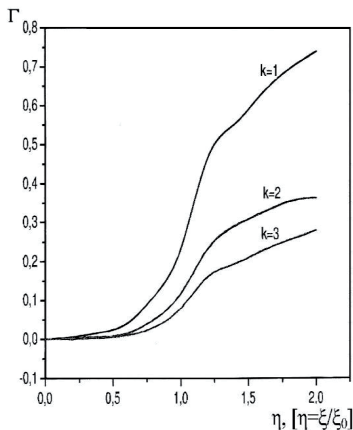


Рисунок 9 - Зависимость ширины уровней от параметра η напряженности поля

На рисунке 10 представлена зависимость вариационного параметра α от параметра η для различных размеров КТ. Именно параметр α отвечает за поведение волновой функции. Отметим, что для кулоновской ВФ α равен единице. Из рисунка 10 видно, что при возрастании параметра k , вариационный параметр α уменьшается, т.е. при возрастании размера КТ параболическая аппроксимация потенциала запираения электронов в КТ не полностью отражает динамику формирования КТ и требуется учет ангармонических поправок.

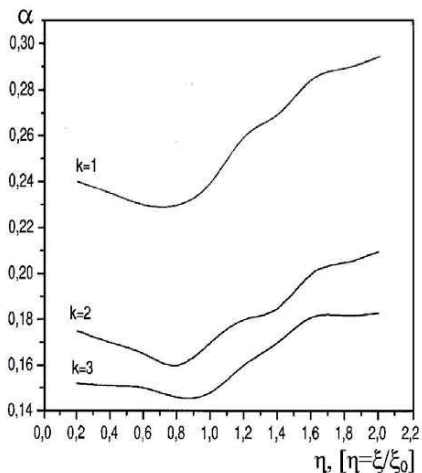


Рисунок 10 - Зависимость вариационного параметра α от параметра напряженности поля η для различных размеров КТ

4.3 Спин – орбитальное взаимодействие двух электронов в квантовой точке

Исследуя спин-орбитальное взаимодействие электронов в квантовой точке определяем волновую функцию и энергетический спектр двухэлектронной КТ. Для этого проводим усреднение по волновой функции внутренней системы. Учитывая (3.2), (3.4) и проводя простые упрощения из (3.1) имеем

$$\left\{ \vec{P}_R^2 + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{8} \rho_R^2 + \frac{\hbar \omega_c}{2} L_{\varphi R} + V_{tot}(R) \right\} \chi(\vec{R}) = E \cdot \chi(\vec{R}), \quad (4.8)$$

где $V_{tot}(R)$ – полный потенциал взаимодействия электронов в КТ, равный

$$V_{tot} = \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R} + 2E_r(R) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\omega_+} \cdot \frac{\partial \omega_+}{\partial R} \right)^2. \quad (4.9)$$

Здесь первое слагаемое в (4.9) является кулоновским потенциалом взаимодействия электронов в КТ, а $E_r(R)$ – потенциал, создаваемый электростатическим полем заряда изображений, который при дальнейших исследованиях используется в виде

$$E_r^{(0)}(R) = \frac{\omega_+^2}{2} - \omega_0 \omega_+ \left(2 \frac{1 - e^{-\omega_+ R}}{\omega_+ R} - e^{-\omega_+ R} \right), \quad (4.10)$$

т.е. без учета квадрупольного взаимодействия. Третье слагаемое в (4.10) связано с относительным движением электронов в КТ, его вклад по сравнению $E_r^{(0)}(R)$ на порядок меньше и при дальнейших исследованиях он также не будет учитываться. Таким образом, все параметры потенциала определены, и он состоит из двух частей. Для понимания характера потенциала (4.10) рассмотрим предельный случай. Пусть $R \ll l$, тогда получаем

$$E_r^{(0)}(R) = \frac{\omega_0^2}{2} \left(-1 + \frac{1}{3} \omega_0^2 R^2 + O(R^4) \right), \quad (4.11)$$

а при $R \rightarrow \infty$, $E_r^{(0)}(R) \Rightarrow 0$. Таким образом, при малых расстояниях ($R \ll l$) электростатический потенциал, созданный зарядом изображений, является потенциалом параболического конфайнмента, т.е. растущим потенциалом. Тогда потенциал (4.9) перепишем в виде

$$V = V_V(R) + V_S(R), \quad (4.12)$$

где V_V – стандартный векторный потенциал, связанный с однофотонным обменом

$$V_V = \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R}, \quad (4.13)$$

и V_S – потенциал запираия электронов в КТ:

$$V_S = \frac{\omega_+^2}{2} - \omega_0 \omega_+ \left(2 \frac{1 - e^{-\omega_+ R}}{\omega_+ R} - e^{-\omega_+ R} \right). \quad (4.14)$$

Таким образом, электроны находятся в квантовой яме под воздействием векторных и запирающих потенциалов, которые созданы электростатическим полем слоев.

В (4.11) мы определили потенциал взаимодействия электронов в КТ. Потенциал взаимодействия состоит из двух частей: V_V – векторный потенциал, соответствующий однофотонному обмену, и V_S – потенциал запираения с учетом полной ангармонической поправки (4.4). При определении потенциала (4.12) мы не учитываем спиновое взаимодействие, т.е. электрон рассматривается как скалярная частица. В данном пункте будем учитывать спиновое взаимодействие электронов, а именно спин – орбитальное взаимодействие двух фермионов, потенциал взаимодействия которых состоит из потенциала, соответствующего однофотонному обмену и потенциалу запираения.

Для двух фермионов гамильтониан спин-спинового взаимодействия получен при выводе уравнения Брейта. Рассмотрим вывод уравнения Брейта. Исходим из релятивистского выражения для амплитуды рассеивания двух частиц

$$M_{fi} = e^2 (\bar{u}^\mu{}_1 \gamma^\mu u_1) D_{\mu\nu}(q) (\bar{u}^\nu{}_2 \gamma^\nu u_2), \quad (4.15)$$

где

$$u_j = \sqrt{2m} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{\vec{p}^2}{8m^2 c^2}\right) w \\ \frac{\vec{\sigma} \vec{p}}{2mc} w \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

и потенциал спин-спинового взаимодействия

$$\begin{aligned} U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}) = & 4\pi e^2 \left\{ \frac{1}{q^2} - \frac{1}{8m_1^2 c^2} - \frac{1}{8m_2^2 c^2} + \frac{(\vec{q}\vec{p}_1)(\vec{q}\vec{p}_2)}{m_1 m_2 q^4} - \frac{\vec{p}_1 \vec{p}_2}{m_1 m_2 \vec{q}_2} + \right. \\ & + \frac{i\vec{\sigma}_1[\vec{q}\vec{p}_1]}{4m_1^2 c^2 \vec{q}^2} - \frac{i\vec{\sigma}_1[\vec{q}\vec{p}_2]}{2m_1 m_2 c^2 \vec{q}^2} - \frac{i\vec{\sigma}_2[\vec{q}\vec{p}_2]}{4m_2^2 c^2 \vec{q}^2} + \frac{i\vec{\sigma}_2[\vec{q}\vec{p}_1]}{2m_1 m_2 c^2 \vec{q}^2} + \\ & \left. + \frac{(\vec{\sigma}_1 \vec{q})(\vec{\sigma}_2 \vec{q})}{4m_1 m_2 c^2 \vec{q}^2} - \frac{\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2}{4m_1 m_2 c^2} \right\}, \quad (4.17) \end{aligned}$$

Функция $U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q})$ - есть оператор взаимодействия частиц в импульсном представлении. Он связан с оператором $U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r})$ в координатном представлении формулой

$$\int e^{-i(p'_1 r_1 + p'_2 r_2)} U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}) e^{i(p_1 r_1 + p_2 r_2)} d^3 x_1 d^3 x_2 = \\ = (2\pi)^3 \delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}'_1 - \vec{p}'_2) U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}). \quad (4.18)$$

Если оператор U представляет собой просто функцию $U(\vec{r})$ ($\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$), то $U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q})$ не зависит от \vec{p}_1, \vec{p}_2 и формула (4.18) сводится к обычному определению компоненты Фурье:

$$\int e^{-i\vec{q}\vec{r}} U(\vec{r}) d^3 x = U(\vec{q})$$

Отсюда ясно, что для нахождения $U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r})$ надо вычислить интеграл

$$\int e^{i\vec{q}\vec{r}} U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{q}) \frac{d^3 q}{(2\pi)^3}$$

и затем заменить \vec{p}_1, \vec{p}_2 операторами $\vec{p}_1 = -i\nabla_1, \vec{p}_2 = -i\nabla_2$, расположив их правее всех других множителей.

Далее вычисляем нужные интегралы для оператора взаимодействия частиц.

$$U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}) = \frac{e^2}{r} - \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2c^2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \delta(\vec{r}) - \\ - \frac{e^2}{2m_1 m_2 c^2 r} \left[\vec{p}_1 \vec{p}_2 + \frac{\vec{r}(\vec{r}\vec{p}_1) p_2}{r^2} \right] - \frac{e^2 \hbar}{4m_1^2 c^2 r^3} [\vec{r}\vec{p}_1] \vec{\sigma}_1 + \frac{e^2 \hbar}{4m_2^2 c^2 r^3} [\vec{r}\vec{p}_2] \vec{\sigma}_2 - \\ - \frac{e^2 \hbar}{2m_1 m_2 c^2 r^3} \{ [\vec{r}\vec{p}_1] \vec{\sigma}_2 - [\vec{r}\vec{p}_2] \vec{\sigma}_1 \} + \frac{e^2 \hbar^2}{4m_1 m_2 c^2} * \\ * \left\{ \frac{\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2}{r^3} - 3 \frac{(\vec{\sigma}_1 \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \vec{r})}{r^5} - \frac{8\pi}{3} \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \delta(\vec{r}) \right\}, \quad (4.19)$$

Полный гамильтониан системы двух частиц в этом приближении

$$H = H_1^{(0)} + H_2^{(0)} + U, \quad (4.20)$$

где $H^{(0)}$ - гамильтониан свободных частиц.
Потенциал взаимодействия двух частиц

$$\begin{aligned} U(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{r}) = & \frac{e^2}{r} - \pi \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \delta(\vec{r}) - \frac{e^2}{2m^2 c^2 r} \left(\vec{p}_1 \vec{p}_2 + \frac{\vec{r}(\vec{r}\vec{p}_1)\vec{p}_2}{r_2} \right) + \\ & + \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2 r^3} \{ -(\vec{\sigma}_1 + 2\vec{\sigma}_2)[\vec{r}\vec{p}_1] + (\vec{\sigma}_2 + 2\vec{\sigma}_1)[\vec{r}\vec{p}_2] \} + \\ & + \frac{1}{4} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \left\{ \frac{\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{\sigma}_1 \vec{r})(\vec{\sigma}_2 \vec{r})}{r^5} - \frac{8\pi}{3} \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \delta(\vec{r}) \right\}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Присутствие членов с $\delta(\vec{r})$ не означает наличия особо сильного взаимодействия.

Различные группы членов в операторе взаимодействия (4.18) имеют различный характер. Члены первой строки имеют число орбитального происхождения. Во второй строке стоят члены, линейные по операторам спина частиц; они отвечают спин-орбитальному взаимодействию. Квадратичные по спиновым операторам члены третьей строки описывают спин-спиновое взаимодействие.

Полученный гамильтониан можно применить к позитронию - водородоподобной системе из электрона и позитрона.

В системе центра инерции оператор импульсов электрона и позитрона: $\vec{p}_- = -\vec{p}_+ \equiv \vec{p}$, где $\vec{p} = i\hbar\nabla$ - оператор импульса относительного движения, соответствующий относительному радиусу - вектору $\vec{r} = \vec{r}_- - \vec{r}_+$. Полный гамильтониан позитрония

$$H = \frac{p^2}{m} - \frac{e^2}{r} + V_1 + V_2 + V_3, \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned}
V_1 &= -\frac{\vec{p}}{4m^3c^2} + 4\pi\mu_0^2\delta(\vec{r}) - \frac{e^2}{2m^2c^2r} \left\{ \vec{p}^2 + \frac{\vec{r}(\vec{r}\vec{p})\vec{p}}{r^2} \right\}, \\
V_2 &= 6\mu_0^2 \frac{1}{r^3} \vec{l}\vec{S}, \\
V_3 &= 6\mu_0^2 \frac{1}{r^3} \left\{ \frac{(\vec{S}\vec{r})(\vec{S}\vec{r})}{r^2} - \frac{1}{3}\vec{S}^2 \right\} + 4\pi\mu_0^2 \left(\frac{7}{3}\vec{S}^2 - 2 \right) \delta(\vec{r}).
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Здесь $\mu_0 = e\hbar/2mc$ - магнетон Бора;

$\hbar\vec{l} = [\vec{r}\vec{p}]$ - оператор орбитального момента;

$\vec{S} = (\vec{\sigma}_+ + \vec{\sigma}_-)/2$ - оператор полного спина системы (его квадрат

$$\vec{S}_2 = \frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1\vec{\sigma}_2).$$

В V_1 включены все поправочные члены чисто орбитального характера; V_2 - спин-орбитальное взаимодействие; V_3 включает в себя спин-спиновое и «аннигиляционное» взаимодействия.

В (4.22) учитывается только векторный потенциал. Если в гамильтониане существует потенциал запираия, то гамильтониан, который представлен в (4.22), определяется аналогично только для векторного потенциала.

Спин-орбитальное взаимодействие фермионов с аналогичным потенциалом взаимодействия хорошо изучено и определено в физике элементарных частиц (в нерелятивистской феноменологической модели кварков) (детали см. в [91]).

Когда гамильтониан состоит из потенциала параболического конфайнмента, то спин-спиновые взаимодействия и спин-орбитальные взаимодействия определяется в следующем в виде:

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^*\hbar^2} \cdot \frac{1}{R} \cdot \left[3 \cdot \frac{d}{dR} V_V(R) - \frac{d}{dR} V_S(R) \right] \cdot (\vec{L} \cdot \vec{S}), \tag{4.24}$$

где $V_V(R)$ – векторный потенциал, а $V_S(R)$ – потенциал запираия электронов в КТ, который представлен в (4.13) и (4.14) соответственно. В (4.24) \vec{L} - оператор орбитального момента, определенный стандартным образом:

$$\hbar\vec{L} = [\vec{x} \times \vec{P}_x] = -i\hbar[\vec{x} \times \vec{\nabla}_x], \quad \vec{L} = -i[\vec{R} \times \vec{\nabla}_R], \tag{4.25}$$

а \vec{S} - оператор спина, существует также тождество

$$(\vec{L} \cdot \vec{S}) = i \left(\vec{R} \cdot [\vec{S} \times \vec{\nabla}_R] \right) \quad (4.26)$$

Полный потенциал взаимодействия электронов в КТ с учетом спин-орбитального взаимодействия равен

$$V_{tot}(R) = V_V(R) + V_S(R) + H_{SL}(R). \quad (4.27)$$

Теперь определим условия, при которых взаимодействие электронов в КТ определяется только спин-орбитальным взаимодействием [92-95]. Вектор – потенциал $V_V(R)$ - обычный отталкивающий кулоновский потенциал, а $V_S(R)$ - удерживающий потенциал электронов в КТ. Мы предполагаем, что существует такое расстояние $R = R_0$, на котором потенциалы отталкивания и удержания компенсируются

$$V_V(R_0) + V_S(R_0) = 0. \quad (4.28)$$

Из этого уравнения определим R_0 как функцию от эффективной массы электрона, эффективного радиуса Бора и суммарного заряда изображения $Z_3 + Z_4$. Учитывая (4.28), проводя необходимые упрощения, из (4.24) для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия электрона в КТ имеем

$$H_{SL} = \frac{1}{m_e^* \hbar^2} \cdot \left[\frac{\omega_+^2}{4R_0} - \frac{2}{R_0^2} \cdot \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \right] \cdot \frac{1}{R_0} \cdot i \left(\vec{R}_0 \cdot [\vec{S} \times \vec{\nabla}_{R_0}] \right) \quad (4.29)$$

Тогда, переходя к безразмерным переменным

$$\begin{aligned} \omega_+ &= \omega_0 \eta, & R_0 &= \frac{\tau}{\omega_0}, \\ \omega_0 &= 4\lambda_+ = \frac{4\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \equiv \frac{4(Z_3 + Z_4)\sqrt{m_e^*}}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \end{aligned} \quad (4.30)$$

и подставляя (4.29) в (4.30), после некоторых упрощений имеем

$$H_{SL} = \frac{1}{m_e^* \hbar^2} \cdot \frac{\omega_0^4}{4\tau_3(Z_3 + Z_4)} \cdot [\tau\eta^2(Z_3 + Z_4) - 2] \cdot i \left(\vec{R}_0 \cdot [\vec{S} \times \vec{\nabla}_R] \right) \quad (4.31)$$

Здесь τ, η - безразмерные переменные, которые, учитывая (4.31) и (4.30), определяют из следующей системы уравнений

$$\begin{cases} \frac{1}{8Z_{tot}} \frac{1}{\tau} + \frac{\eta^2}{4} - \frac{1-e^{-\eta\tau}}{\tau} + \frac{\eta}{2} e^{-\eta\tau} = 0, \\ \eta - (1 + \eta\tau)e^{-\eta\tau} = 0. \end{cases} \quad (4.32)$$

Из этой системы уравнений η , τ - определяется как функция от суммарного заряда изображения $Z_{tot}=Z_3+Z_4$. Учитывая определение спиновых ($\vec{s} = \frac{1}{2} \cdot \sigma$) и импульсных ($\vec{p}_x = -i\vec{\nabla}_x$) операторов, а также выделяя размерность параметра, т.е. K_{SO} - эффективную константу спин-орбитального взаимодействия, из (4.32) для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия получаем

$$H_{SL} = K_{SO} (\sigma_x P_y - \sigma_y P_x), \quad (4.33)$$

где σ - матрица Паули и

$$K_{SO} = \frac{1}{2} m_e \alpha_{em}^2 \cdot r_e \cdot \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{x_b^2} \left[2 - \tau \eta^2 Z_{tot} \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \right], \quad (4.34)$$

где α_{em} - стандартная константа связи электромагнитного взаимодействия;

$0,5 m_e \alpha_{em}^2 = 13,605698 \text{ эВ}$ - стандартная энергия Ридберга;

$r_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e} = 2,81794 \cdot 10^{-15} \text{ м}$ - классический радиус электрона;

x_b - расстояние между электронами, на котором происходит аннулирование векторных и запирающих потенциалов и безразмерных переменных, т.е. в единицах радиуса Бора

$$x_b = \frac{x}{a_b} = \tau \cdot \frac{\varepsilon}{4Z_{tot}} \cdot \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2. \quad (4.35)$$

Тогда окончательно из (4.35) для эффективной константы спин-орбитального взаимодействия имеем

$$K_{SO} = 0,06134 \cdot \left(\frac{m_e}{m^*} \right)^2 \cdot \frac{Z_{tot}^2}{\varepsilon^3 \tau^2} \left[2 - \tau \cdot \eta^2 Z_{tot} \right] \left[10^{-11} \text{ эВ} \cdot \text{м} \right] \quad (4.36)$$

Таким образом, из (4.35) и (4.36) видно, что расстояния между электронами, которые соответствуют усилению спин - орбитальных взаимодействий между электронами в КТ, и эффективная константа связи спин – орбитального взаимодействия зависят от ε - диэлектрической проницаемости КТ и эффективной массы электрона, а также от суммарного заряда изображения.

Значение этих параметров, зависит от конкретной структуры нанокристалла [96]. Поэтому для изучения зависимости эффективной константы спин-орбитального взаимодействия от диэлектрической проницаемости различных слоев, а также от эффективной массы электрона, нам нужно рассмотреть конкретные соединения.

Используя полученные аналитические выражения для эффективной константы (4.36), рассмотрим зависимость от значения диэлектрической проницаемости или от суммарного значения заряда изображения. Мы предполагаем, что заряд изображений является положительным. Именно такое предположение дает возможность объяснить механизм запираания электронов в КТ. Из (2.1) видно, что значение заряда изображения зависит от разности величин диэлектрической проницаемости соединений. С другой стороны, в настоящее время известно, что существуют наноструктуры, в которых различие диэлектрической проницаемости слоев влияет на их электрические и оптические свойства. Такими наноструктурами являются: полупроводниковые нанокристаллы [97-104] или квантовые нити [101] в диэлектрической матрице, а также пористый кремний [103] и др. Из (2.1) следует, что диэлектрическая проницаемость квантовой ямы и КТ всегда должны быть меньше, чем диэлектрическая проницаемость слоев, для того чтобы заряд изображений был положительным, т.е.

$$\varepsilon < \varepsilon_1 \quad \text{и} \quad \varepsilon < \varepsilon_2 \quad (4.37)$$

Поэтому диэлектрическую проницаемость КТ мы должны выбрать таким образом, чтобы она удовлетворяла условию (4.37). В данный момент значения диэлектрической проницаемости слоев, составляющие конкретные соединения химических элементов, измерены более точно. Эффективная константа спин – орбитального взаимодействия квадратично зависит от эффективной массы электрона. С другой стороны, эффективная масса электрона в наноструктуре, конечно зависит от состава соединений. Последние экспериментальные исследования показывают, что эффективная масса электрона зависит от электронной плотности в соединениях, а также от линейного размера КТ [103, 105]. Поэтому K_{SO} зависит от электронной плотности слоев и линейного размера КТ.

Рассмотрим двухэлектронную КТ, которая образована на границе соединений $GaAs$ и $GaAlAs$. Диэлектрическая проницаемость этих соединений в зависимости от размера КТ (подробно см. [59, 106-108]):

$$\varepsilon_{GaAs}=6,1; \quad 13, \quad (4.38)$$

а эффективная масса электрона равна $m_e^* = 0,067m_e$. Согласно (4.37) и учитывая (4.30), выбираем диэлектрическую проницаемость КТ в интервале

$$\varepsilon = \varepsilon_w = 1 - 5. \quad (4.39)$$

Зависимость эффективной константы связи спин – орбитального взаимодействия K_{SO} (4.36) при конкретных значениях эффективной массы электрона от Z_{tot} - суммы заряда изображений – аналитически определена и представлена на рисунке 11. Из рисунка 11 видно, что с возрастанием Z_{tot} K_{SO} также увеличивается. При малых значениях диэлектрической проницаемости КТ возрастание константы связи спин – орбитального взаимодействия становится резким. Зависимость от расстояния между электронами x , на котором происходит взаимное сокращение векторных и скалярных потенциалов, от Z_{tot} представлена на рисунке 12. Благодаря Z_{tot} электроны запираются в КТ, поэтому при возрастании значения Z_{tot} расстояние x между электронами уменьшается. Однако эти уменьшения обратно пропорциональны диэлектрической проницаемости КТ. На рисунке 13 представлена зависимость K_{SO} от расстояния между электронами, которая определена из условия усиления спин – орбитальных взаимодействий между электронами в КТ. Из рисунка 13 также видно, что с увеличением x при конкретных значениях диэлектрической проницаемости, т.е. для конкретного соединения наноструктуры K_{SO} уменьшается.

Эффективная константа спин – орбитального взаимодействия для структуры $InGaAs$ с эффективной массой электрона $m_e^* = 0,042m_e$ экспериментально определена в [109, 110]: $K_{SO} = 1,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м. Из нашего аналитического результата при значении параметров $\varepsilon = 3$ и $Z_{tot} = 0,68$, из (4.36) имеем $K_{SO} = 1,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м. К сожалению, в нашей модели пока много свободных параметров. Наш аналитический результат дает возможность определить константу спин – орбитального взаимодействия. Для этого нужно экспериментально установить значения следующих параметров: эффективной массы электрона, диэлектрическую проницаемость квантовой ямы и диэлектрическую проницаемость соединения. Мы уверены, что экспериментально определить значения этих параметров для конкретных соединений, в частности для $GaAs$ и $GaAlAs$, не так сложно.

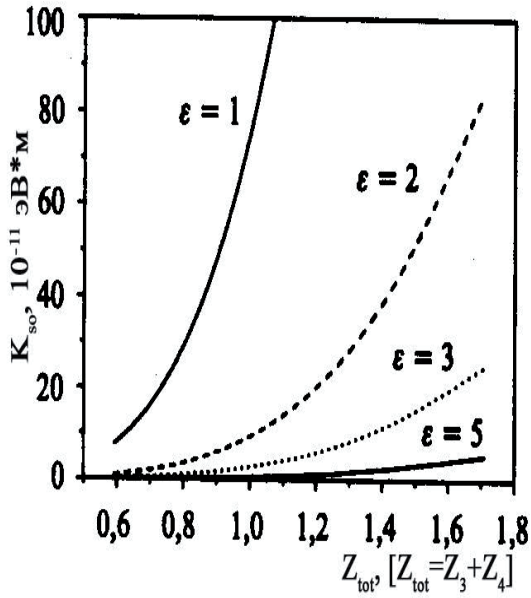


Рисунок 11 - Зависимость константы связи спин – орбитального взаимодействия от суммы зарядов изображений.
 Константа связи в единицах 10^{-11} Эв·м

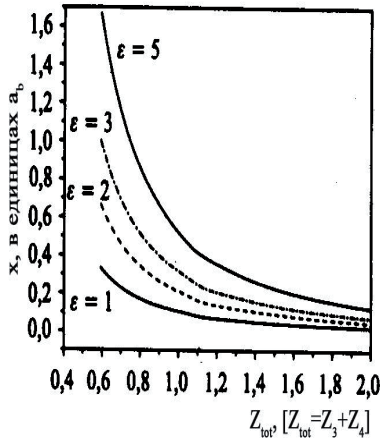


Рисунок 12 – Зависимость расстояния между электронами в КТ от суммы зарядов изображений.
 Расстояния между электронами в единицах радиуса Бора

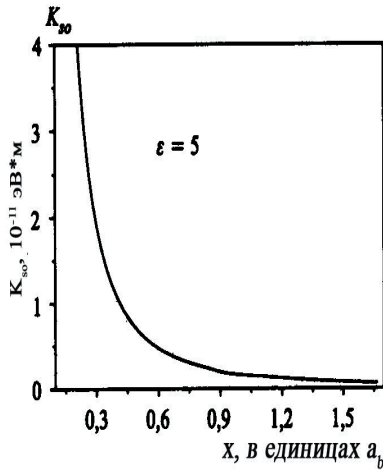


Рисунок 13 – Зависимость константы связи спин – орбитального взаимодействия от расстояния между электронами в КТ.
 Константа связи в единицах 10^{-11} эВ*м.
 Расстояния между электронами в единицах радиуса Бора

4.4 Краткие выводы

Рассмотрено дипольное взаимодействие электронов в КТ. Установлено, что потенциал удержания электронов в КТ имеет как симметричную, так и антисимметричную части. Именно антисимметричная часть потенциала определяет дипольное взаимодействие электронов в КТ, которое может привести к туннельному переходу электронов из КТ. Также установлено, что туннельный переход возможен при сильном электрическом поле. Однако, двухэлектронная КТ находится во внешнем магнитном поле, и дипольное электрическое поле созданное зарядом изображений не достаточно сильное, поэтому вероятность наблюдения туннельного перехода очень мала.

Исходя из предположений, что: во-первых, при описании механизма формирования КТ квантово–механические эффекты играют существенную роль; во-вторых, необходим учет многополярности нанокристаллических структур – аналитически определен потенциал взаимодействия электронов в КТ, который создан электростатическим полем суммарного заряда изображений. Показано, что полный потенциал взаимодействия электронов в КТ состоит из двух частей: потенциала однофотонного обмена и потенциала удержания электронов в КТ.

Предполагая, что существует такое расстояние, на котором потенциалы отталкивания и удержания электронов в КТ компенсируются, взаимодействие электронов в КТ определяется только спин – орбитальным взаимодействием. Исходя из этих предположений зависимость эффективной константы связи спин – орбитального взаимодействия K_{SO} (4.36) при конкретных значениях эффективной массы электрона от Z_{tot} - суммы заряда изображений – аналитически определена. Эффективная константа спин – орбитального взаимодействия для структуры *InGaAs* с эффективной массой электрона $m^*=0,042m_e$ экспериментально определена в [109, 110]: $K_{SO}=1,5 \cdot 10^{11}$ эВ·м. Из нашего аналитического результата при значении параметров $\varepsilon=3$ и $Z_{tot}=0,68$, из (4.36) имеем $K_{SO}=1,5 \cdot 10^{11}$ эВ·м.

Изучена зависимость константы спин – орбитального взаимодействия от зарядов изображений и от расстояния между электронами. При малых значениях диэлектрической проницаемости КТ возрастание константы связи спин – орбитального взаимодействия становится резким. Благодаря Z_{tot} электроны запираются в КТ, поэтому при возрастании значения Z_{tot} расстояние x между электронами уменьшается. Однако установлено, что эти уменьшения обратно пропорциональны диэлектрической проницаемости КТ. Также с увеличением x при конкретных значениях диэлектрической проницаемости, т.е. для конкретного соединения наноструктуры K_{SO} уменьшается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С учетом неоднородности среды в механизме формирования квантовых точек мы определили потенциал взаимодействия электронов в КТ. Важность неоднородности среды приводит к введению заряда изображений, которые обуславливаются разностью диэлектрических проницаемостей слоев. Согласно условиям образования КТ, диэлектрические проницаемости двух граней не должны быть одинаковыми. Каждая грань, которая образована КТ состоит из нескольких химических элементов. В нашем случае, поверхность этих граней гладкая, мы не учитывали шероховатости граней, но это приводило бы к дополнительным взаимодействиям: как дипольным, так и квадрупольным, а также окупольным моментам. В результате учета гладкости граней получили потенциал параболического конфайнмента. Также установили, что при малых расстояниях электронов в КТ существует парное кулоновское взаимодействие и вывели параболический конфайнмент. Отметим, что потенциал удержания электронов в КТ может заметно отличаться от параболического типа, особенно при малых значениях магнитного поля, что может быть проверено при анализе спиновых осцилляций основного состояния двухэлектронной системы в магнитных полях. Таким образом, установлено, что при сильных магнитных полях гипотеза о параболическом характере потенциала удержания для двухэлектронной системы является оправданной.

Потенциал параболического конфайнмента зависит от размера КТ, при возрастании размера КТ параболическая аппроксимация потенциала запираения электронов в КТ не полностью отражает динамику формирования КТ и требуется учет ангармонических поправок. Если искусственно ввести ангармоническую поправку к потенциалу параболического конфайнмента, то нарушается условие теоремы Кона, т.е. электрон - электронное взаимодействие зависит только от относительных расстояний. Поэтому выяснение механизма возникновения ангармонических поправок к потенциалу запираения, является важнейшей проблемой при исследовании механизма формирования КТ с кулоновским взаимодействием. Наш подход дает не только нулевое приближение, параметр u который связан с зарядом изображений, считаем малым $u \ll 1$ и проводим разложение по степеням малого параметра. Именно при $u \ll 1$ приближении, мы получаем ангармоническую поправку.

Используя адиабатическое приближение в рамках осцилляторного представления, аналитически вычислен энергетический спектр квантовой точки при различных значениях магнитного поля, а также с учетом ангармонической поправки. Показаны энергетические спектры гамилтониана относительного движения в зависимости от t относительной напряженности внешнего магнитного поля для параболического и квазипараболического потенциала. В слабых магнитных полях синглет-триплетные переходы для квазипараболического потенциала происходят при более высоких значениях магнитного поля. Поэтому при сильных магнитных полях в пределе $t \rightarrow \infty$,

вклад потенциала, связанного с квазипараболической структурой, менее заметен.

Основной вклад для создания потенциала параболического конфайнмента дает потенциал, созданный электростатическим полем заряда изображения. Установлено, что при малых расстояниях электростатический потенциал, созданный зарядом изображений, является потенциалом параболического конфайнмента. Показана зависимость потенциала, создаваемого электростатическим полем заряда изображений, а также потенциала, связанного с относительным движением электронов, от параметра R . При возрастании R частота осциллятора ω плавно уменьшается от 4,619 до 0. Потенциал связанного с относительным движением электронов в начале координат равен нулю, на малых расстояниях он возрастает, а затем при дальнейшем возрастании R быстро убывает. Потенциал, созданный зарядом изображений при $R=0$ является конечным, т.е. сингулярность отсутствует, а при $R=\infty$ убывает, как кулоновский. Величина потенциала, связанного с относительным движением электронов, на порядок меньше абсолютного значения электростатического потенциала, созданного зарядом изображений. Таким образом, основной вклад в потенциал удержания определяется взаимодействием электронов в электростатическом поле заряда изображений.

Управление движением электронов в наноструктурах осуществляются воздействием на электрический заряд электрона с помощью внешнего электрического поля или воздействием на спин электрона с помощью внешнего магнитного поля. В традиционной электронике управление движением электронов осуществляется воздействием на электрический заряд электрона, в этих случаях происходит многоэлектронный переход. Согласно принципу Паули, на одном энергетическом уровне не могут одновременно находиться два одинаковых электрона, и один электрон переходит на находящийся выше уровень или выходит из квантовой ямы, или квантовой точки. С помощью этого взаимодействия можно управлять расположением электрона в КТ. В нашем случае размер данного объекта является очень маленьким, в низкоразмерных объектах это технически невозможно, поэтому возникает вопрос, можно ли управлять переходом электронов через воздействие спина, т.е. при каких условиях спин-орбитальное взаимодействие доминирует над кулоновским взаимодействием между электронами в КТ. Исходя из этого, мы определили константу связи спин-орбитального взаимодействия. Показана зависимость константы спин-орбитального взаимодействия от зарядов изображений и от расстояния между электронами. Возможность контролировать и управлять свойствами квантовых точек привлекает к ним огромный интерес, так как они могут быть использованы, например, в качестве новой элементной базы для нанoeлектроники.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Фейнман Р. Ф. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир физики // Российск. хим. журн. - 2002. - Т. 46, №5. - С. 4-6.
- 2 Feynman R. P. There is plenty of room at the bottom: an invitation to enter a new field of physics. <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>.
- 3 Taniguchi N. On the basic concept of nanotechnology // Proc. Int. Conf. Prog. Eng. Part II. Tokyo: Jap. Soc. Pres. Eng. - 1974. - p. 386.
- 4 Maksym M., Chakraborty T. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions // Phys. Rev. Lett. - 1990, Vol. 65. - P. 108-115.
- 5 Merkt U., Huser J., Wagner M. Eigenfunction-expansion method for solving the quantum-wire problem: Formulation G // Phys. Rev. B. - 1991, - Vol. 43. - P. 7320-7323.
- 6 Wagner M., Merkt U., Chaplik A.V. Spin-singlet-spin-triplet oscillations in quantum dots // Phys. Rev. B. - 1992. - Vol. 45. - P.1951-1954.
- 7 Dineykan M, Nazmitdinov R.G. Two-electron quantum dot in a magnetic field: Analytical results // Phys. Rev. B. - 1997. - Vol. 55. - P. 13707-13715.
- 8 Bo Su, Goldman V. J., and Cunningham J. E. Single-electron tunneling in nanometer- scale double-barrier heterostructure devices // Phys. Rev. B. - 1992. - Vol. 46. - P. 7644-7655.
- 9 Ashori R.C., Stormer H.L., Weiner J.S. L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West. N-electron ground state energies of a quantum dot in magnetic field Phys. Rev. Lett. - 1993. -Vol. 71. - P. 613-619.
- 10 Ashoori R.C. Electrons in Artificial Atoms // Nature (London). - 1996. - Vol. 379. - P. 413-417.
- 11 Demel T., Heitmann D., Grambow P., and Ploog K. Nonlocal dynamic response and level crossings in quantum-dot structures // Phys. Rev. Lett. - 1990. - Vol. 64. - P. 788-795.
- 12 Pannkuche D., and Gerhardts R. R. Self-consistent model of magnetoplasmons in quantum dots with nearly parabolic confinement potentials // Phys. Rev. B. - 1991. - Vol. 43. -P. 12098-12106.
- 13 Динейхан М., Жаугашева С.А., Назмитдинов Р.Г. О формировании потенциала удержания в двухэлектронной квантовой точке // ЖЭТФ. - 2001. - Т. 119. - P.1210-1221.
- 14 Kohn W. Cyclotron Resonance and Haasvan Alphen Oscillations of an Interacting Electron Gas // Phys. Rev. B. - 1961. - Vol.123. - P. 1242-1256.
- 15 Chakraborty T. Physics of Artificial Atoms: Quantum Dots in a Magnetic Field // Comments Condens. Matter Phys. - 1992. - Vol. 16. - P. 35-41.
- 16 Gleiter H. Materials with ultrafine microstructure: retrospectives and perspectives // Nanostruct. Mater. - 1992. - V. 1, №1. - P. 1-19.
- 17 Birringer Д., Gleiter II. Nanocrystalline materials // Encyclopedia of Material Science and Engineering. Suppl. -1988. -Vol. 1. - P. 339-349.

18 Siegel R. W. Nanostructured materials — mind over matter // Nanostruct. Mater. -1993. -V. 3, № 1. - P. 1-18.

19 Schaefer H.E. Interfaces and physical properties of nanostructured solids // Mechanical Properties and Deformation Behavior of Materials Having Ultra-fine Microstructure. /Eds. M. A. Nastasi, D. M. Parkin, H. Gleiter. - Netherlands, Dordrecht: Kluwer Academic Press. - 1993. - P. 81-106.

20 Siegel R. W. What do we really know about the atomic-scale structures of nanophase materials? // J. Phys. Chem. Solids. -1994. -V. 55, №10. -P.1097-1106.

21 Морохов И. Д., Петин В. И., Трусов Л. И., Петрунин В. Ф. Структура и свойства малых металлических частиц // УФН. - 1981. -Т. 133, №4. - С. 653-692.

22 Морохов И. Д., Трусов Л. И., Лаповок В.Н. Физические явления в ультрадисперсных средах. - М.: Энергоатомиздат, 1984. - 224 с.

23 Гусев А. И. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях // УФН. - 1998. -Т. 168, №1. - С. 55-83.

24 Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications. /Eds. A. S. Edelstein, R. C. Cammarata. - Baltimor: The Johns Hopkins University, - 1998. – 620 p.

25 Gleiter H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure // Acta Mater. - 2000. - V.48, №1. - P. 1-29.

26 Mayo M. J. Processing of nanocrystalline ceramics from ultrafine particles // Int. Mater. Rev. - 1996. - V.41, №1. - P. 85-115.

27 Суздаев И. П., Суздаев П. И. Нанокластеры и нанокластерные системы // Успехи химии. - 2001. Т. 70, №3. - С. 203-240.

28 Третьяков Ю.Д., Лукашин А.В., Елисеев А.А., Суздаев И.П., Максимов Ю.В., Имшенник В.К., Новичихин С.В., Матвеев В.В., Малыгин А.А., Соснов Е.А. Иерархия строения и магнитные свойства наноструктуры оксидов железа // Российские нанотехнологии. – 2006. Т.1, №1. – С. 134-141.

29 Cox D.M., Tevor D.J., Whetten R.L., Rohlfing E.A., Kaldor A. Smooth and coherent layers of GaAs and AlAs growth by molecular beam epitaxy // Phys. Rev. B. – 1985. Vol. 32. - P. 7290-7308.

30 Rohlfing E. A., Cox D. M., Kaldor A. Production and characterization of supersonic carbon cluster beams // J. Chem. Phys. - 1984. -Vol.81, №7. - P. 3322-3330.

31 Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C. C₆₀: buckminsterfullerene // Nature - 1985. - V.318, № 6042. - P. 162-163.

32 Mintmire J. W., Dunlap B. I., White C. T. Are fullerene tubules metallic? // Phys. Rev. Lett. - 1992. Vol. 68., №5. - P. 631-634.

33 Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // Nature. - 1991. - Vol.354, №6348. P. 56-58.

34 Iijima S., Ajayan P. M., Ichihashi T. Growth model for carbon nanotubes // Phys. Rev. Lett. - 1992. - Vol.69, №21.- P.3100-3103.

35 Calvert P. Strength in disunity // Nature. - 1992. - Vol.357, №6377. - P. 365-366.

- 36 Iijima S. Carbon nanotubes // MRS Bulletin. - 1994. - Vol. 19, №11. - P. 43-49.
- 37 Dresselhaus M. S. Future directions in carbon science // Ann. Rev. Mater. Sci. - 1997. Vol.27, №1. - P. 1-34.
- 38 Andre K. Geim, Philip Kim. Carbon Wonderland // Scientific American. - 2008. №4. - P. 90-97.
- 39 Кремер Г. Квазиэлектрическое поле и разрывы зон. Обучение электронов новым фокусам // УФН. - 2002. -Т. 172, №9. - С. 1091-1101.
- 40 Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры / Под ред. Л. Ченга, К. Плога. - М.: Мир, 1989. - 584 с.
- 41 Dingle R., Wiegmann W., Henry C.H. Quantum states of confined carriers in very thin AlGa_xAs-GaAs-AlGa_{1-x}As heterostructures // Phys. Rev. Lett. - 1974. - Vol.33, №14. - P. 827-830.
- 42 Heath J. R., Williams W.S., Shiang J. J. Spatially confined chemistry: Fabrication of Ge quantum dot arrays // J. Phys. Chem. - 1996. -Vol. 100, №8. -P. 3144-3149.
- 43 Леденцов Н. Н., Устинов В. М., Щукин В. А. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // ФТП. -1998. - Т. 32, №4. - С. 385-410.
- 44 Асеев А.Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники // Российские нанотехнологии. – 2006. – Т. 1. – С. 97-110.
- 45 Данилюк А.Ф., Солодова Т.А., Копылова Т.Н., Майер Г.В., Вайтулевич Е.А., Светличный В.А., Еремина Н.С., Самсонова Л.Г., Тельминов Е.Н. Структура и свойства органических нанокомпозитов для квантовой электроники // Российские нанотехнологии. – 2007. – Т. 2. – С. 67-71.
- 46 Гусев А. И. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях. // УФН. 1998. Т. 168, №1. С. 55-83.
- 47 Гусев А. И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства - Екатеринбург: УрО РАН, 1998. - 200 с.
- 48 Гусев А. И., Ремпель А. А. Нанокристаллические материалы. - М.: Наука-Физматлит, 2000. - 224 с.
- 49 Gusev A.I., Rempel A. A. Nanocrystalline Materials. - Cambridge: Cambridge Intern. Science Publ., 2004. - 351 p.
- 50 Лариков Л. Н. Диффузионные процессы в нанокристаллических материалах // Металлофизика и новейшие технологии. 1995. Т. 17, № 1. С. 3-29.
- 51 Наймарк О. Б. Нанокристаллическое состояние как топологический переход в ансамбле зернограничных дефектов // ФММ. 1997. Т. 84, №4. С.5-21.
- 52 Kroner E. On gauge theory in defect mechanics trends in application of pure mathematics to mechanics. Lecture Notes in Physics. / Eds. E. Kroner and K. Kinchassner. - Heidelberg: Springer, 1986. - P. 281-296.
- 53 Kadic A., Edelen D. G. B. A Gauge Theory of Dislocations and Disclinations. - Berlin: Springer, 1983. - 186 p.

54 Turton R. The Quantum Dot // A Journey into Future Microelectronics. Oxford University Press, New York. - 1995.

55 Kastner M.A. Artificial Atoms // Phys. Today. -1993. –Vol. 46. P. 24-32.

56 Jacak L., Hawrylak P., Wojs A. Quantum Dots / Springer-Verlag, Berlin - 1997.

57 Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – Москва: Наука, 1982. –532 с.

58 Гишпиус Н.А., Кулаковский В.Д. и Тиходеев С.Г. Влияние перераспределения электрического поля на электронные и оптические свойства наноструктур // УФН. – 1997. – Т.167. -P.558-562

59 Муляров Е.А., Тиходеев С.Г. Диэлектрическое усиление экситонов в полупроводниковых квантовых нитях // ЖЭТФ. – 1997. –Т. 111. – Р. 274-281

60 Динейхан М., Жаугашева С.А., Калкозова Ж.К. Аналитическое определение потенциала удержания и константы связи спин-орбитального взаимодействия электронов в наноструктурах, Препринт Р17-2005-94, Дубна, 2005. -20 с.

61 Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. - М.: Наука, 1976. - 320 с.

62 Винницкий С.И., Пономарев Л.И. Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием // ЭЧАЯ. - 1982. - Т.13. - С. 1336-1341.

63 Born M., Oppenheimer R. Quantum theory of molecules // Annalen der Physik. -1927. -Bd84, №9. P. 457-484.

64 Born M., Fock V. Beweis des Adiabatenatzes // Zs.phys. -1928. - Bd51. - P.165-170.

65 Abramowitz M. and Stegun. Handbook of mathematical functions with formulas graphs and mathematical tables /National bureau of Standorts Applied Mathematics. Series, - 1964.

66 Solov'ev E.A. Intramolecular heavy-atom effect in the photophysics of organic molecules // Usphehi Phys. Nauk. – 1989. - Vol. 157. - P. 535-542.

67 Barber W.G. and Hasse H.R. The two centre problem in wave mechanics // Proc.Cambr.Philos. Soc. -1935., -Vol. 31. - P.564-574.

68 Bates D.R., Ledsham K., and Stewart A.L. Wave Functions of the Hydrogen Molecular Ion // Roy.Sos. London, Ser. A. – 1953. - Vol. 246. -P.215-240.

69 Динейхан М. и Ефимов Г.В. Квантовая механика связанных состояний в осцилляторном представлении // ЭЧАЯ. -1995. – Vol. 26. P. 651-717

70 Dineykhon M., Efimov G.V., Ganbold G. and Nedelko S.N. Oscillator representation in quantum physics Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Berlin. - 1995. - m.26. 279 p.

71 Фок В.А. Начало квантовой механики. - М.: Наука, 1976. – 376 с.

72 Фок В.А. Об уравнении Шредингера для атома гелия. // Изв. Ан СССР, серия физическая. – 1954. –Т. 18. -С.161-172.

73 Fradkin E.S. Fusion rules and modular transformations in 2D conformal field theories // Nucl.Phys. – 1963. – Vol. 49. P. 624-635.

74 Hayashi K., Hirayama M., Muta T. New general relativity // Fortschr. Phys. – 1967. -Vol. 15. - P.625-632.

75 Salam A. Nonpolynomial Lagrangians. Renormalization and Gravity / Gordon and Breach Science Publ., N.Y. - 1971. 486 p.

76 Dineykhon M. and Efimov G.V. Zeeman effect in the oscillator representation // Rep. Math. Phys. – 1995. –Vol. 36. P.287-291.

77 Dyson F. J. Divergence of Perturbation Theory in Quantum Electrodynamics // Phys. Rev. B. -1952. -Vol. 85. –P. 631-635.

78 Fry P.W., Itskevich I.E., Mowbrad D.J., Skolnick1 M. S., Finley1 J. J., Barker J. A., O'Reilly E. P., Wilson L. R., Larkin I. A., Maksym P. A., Hopkinson M., Al-Khafaji M., David J. P. R., Cullis A. G., Hill G., and Clark J. C. Inverted Electron-Hole Alignment in InAs-GaAs Self-Assembled Quantum Dots // Phys. Rev. Lett. - 2000. –Vol. 84. –P.733-737.

79 Patane A., Levin A., Polimeni A., Schindler F., Main P. C., Eaves L., and Henini M. Universality of the Stokes shift for a disordered ensemble of quantum dots // Appl. Phys. Lett. -2000. -Vol. 77. –P. 297-303.

80 Barker J.A. and O'Reilly E.P. Theoretical analysis of electron-hole alignment in InAs-GaAs quantum dots // Phys.Rev. B. – 2000. –Vol. 61. –P. 13840-13851.

81 Sheng W. and Leburton J.P. Electron-hole alignment in InAs/GaAs self-assembled quantum dots: Effects of chemical composition and dot shape // Phys.Rev. B. -2001. - Vol. 63. P. 161301-161311.

82 Janssens K.L., Partoens B., Peeters F.N. Stark shift in single and vertically coupled type-I and type-II quantum dots // Phys. Rev. B. -2002. – Vol. 65. – P. 233301-233312.

83 Wolf S.A., Awschalom D. D., Buhrman R. A., Daughton J. M., Molnar von S., Roukes M. L., Chtchelkanova A. Y., Treger D. M. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future // Science. - 2001. - V.294. - P.1488-1492.

84 Рашба Э.И. Свойства полупроводников с петлей экстремумов, // ФТТ. - 1960. - Т.2.- С.1224 - 1233.

85 Bychkov Y.A., Rashba E.I. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy // JETP Lett. - 1984. - V.39. -P.78-84.

86 Rashba E.I., Shoka V.I. Landau. Level Spectroscopes / Eds. G. Landwehr and E.I. Rashba. Elsevier. 1991. -178p.

87 Ландау Л.Д. и Лифшиц Е.М., Квантовая механика, нерелятивистской теории. –М.: Наука, 1989. -767 с.

88 Калкозова Ж. О механизме туннелирования электронов в квантовой точке. // Тезисы докл. 58-й Республиканской научной конференции молодых ученых и студентов. – Алматы, 2004. – С. 53.

89 Динейхан М., Жаугашева С.А., Калкозова Ж.К., Определение Штарковского расщепления энергетического спектра в двухэлектронной квантовой точке // ФИЗИКА Известия ВУЗов Россия, - 2005. -№5. –С. 9-20.

90 Динейхан М., Сарсембинов Ш.Ш., Калкозова Ж. Моделирование электронных процессов в нанокристаллических структурах. // Тезисы докладов 8-ой международной конференции «Физика твердого тела», - Алматы, 2004. - С. 376-377.

91 Lucha W., Schoberl F., Gromes D. Bound states of quarks // Phys. Rep. B. - 1991.-V. 200. -P. 127-130.

92 Калкозова Ж. Влияние многокомпонентной среды на формирование квантовых точек. // Тезисы докл. 59-й Республиканской научной конференции молодых ученых и студентов. – Алматы, 2005. – С. 64.

93 Динейхан М., Сарсембинов Ш.Ш, Калкозова Ж. Изучение механизма формирования квантовых точек с учетом нанокристаллических структур // Вестник КазГУ, Серия физ. -2004. -№2 (17). С. 125-232.

94 Динейхан М., Жаугашева С.А., Сарсембинов Ш.Ш., Калкозова Ж.К. Определение энергетического спектра Рашба гамильтониана взаимодействия // Вестник КазГУ, Серия физ. -2005. №2(20). -С. 80-87.

95 Динейхан М., Сарсембинов Ш.Ш., Калкозова Ж.К. Исследование механизма формирования квантовой точки в спинтронных системах // Доклады Национальной академии наук РК, Физика. - 2006. - №2. - С. 35-40.

96 Динейхан М., Жаугашева С., Калкозова Ж. Определение энергетического спектра Рашба гамильтониана взаимодействия. // Тезисы докладов 4-ой международной научной конференции «современные достижения физики и фундаментальное физическое образование», - Алматы, 2005, - С. 50.

97 Екимов А. И., Онущенко А. А., Цехомский В. А. Экситонное поглощение кристаллами CuCl в стеклообразной матрице // Физ. хим. стекла. - 1980. -Т. 6. - С. 511-512.

98 Эфрос Ал. А., Эфрос А.Л. Межзонное поглощение в полупроводниковом шаре // ФТП. - 1982. -Т. 16. -№ 7. - С. 1209–1214.

99 Bawendi M.G., Wilson W. L., Rothberg L., Carroll P. J., Jedju T. M., Steigerwald M. L., and Brus L. E. Electronic structure and photoexcited-carrier dynamics in nanometer-size CdSe clusters // Phys. Rev. Lett. -1990. -V. 65. -P. 1623-1625.

100 Ekimov A. I., Efros Al. L., Onushenko A.A. Quantum Size Effect in Semiconductor Microcrystals // Sol. St. Comm. -1993. -V.88. -P. 947-653.

101 Poborchii V.V., Ivanova M.S., Salamatina I.A. Quantum tunnel reflectors and superlattices on their basis // Superlattices and Microstructures. - 1994. - V.16. - P. 133-136.

102 Dneprovskii V., Gushina N., Okorokov D., Karavanskii V. and Dovidenko E. Saturation of optical transitions in quantum dots and wires of porous silicon. //Superlattices and Microstructures. -1995. -Vol. 17. -P. 41-45.

103 Canham L.T. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers // *Appl. Phys. Lett.* -1990. -V.57. -P. 104-111.

104 S.P. Bardakhanov, V.A. Volodin, M.D. Efremov, V.V. Cherepkov, S.N. Fadeev, A.I. Korchagin, D.V. Marin, M.G. Golkovskiy, Yu.Yu. Tanashev, V.I. Lysenko, A.V. Nomoev, D. Sangaa Synthesis of silicon nanopowder by electron beam ablation of si ingot at atmospheric pressure // *International Conference on Methods of Aerophysical Research, ICMAR 2008.* – P. 1-2.

105 Шашкин А.А. Переходы металл-диэлектрик и эффекты электрон-электронного взаимодействия в двумерных электронных системах // *УФН.* - 2005. - Т. 175. - С.139 – 161.

106 Орлов Ф.Л., Ивина Н.А. Формирование структуры квантовых нитей InGaAs в матрице арсенида галлия // *ФТТ.* – 2004. - Т.46, №5. С. 913-918.

107 Ушаков В.В., Аронин А.С., Караванский В.А., Гиппиус А.А. Формирование и оптические свойства полупроводниковых нанокристаллов CdSSe в матрице силикатного стекла // *ФТТ.* – 2009. - Т. 51, №10. С. 2036-2040.

108 Григорьев С.В., Чумаков А.П., Сыромятников А.В., Григорьева Н.А., Огороков А.И., Напольский К.С., Росляков И.В., Елисеев А.А., Лукашин А.В., Эккерлебе Х. Магнитные свойства двумерной пространственно упорядоченной системы никелевых нанонитей // *ФТТ.* – 2010. - Т. 52, №5. С. 1011-1016.

109 Lucovsky G. , Martin R. M. A molecular model for the vibrational modes in chalcogenide glasses // *Sol. St. Comm.* -1976. -V. 18. -P. 811-815.

110 Schapers Th., Knobbe J. Magnetosubbands of semiconductor quantum wires with Rashba spin-orbit coupling // *J. Appl. Phys.* -1998. -V. 83. -P. 4324-4230.

Представление канонических переменных в нормальной форме

Важным элементом вычислений в ОП [61, 62] является представление канонических переменных в нормальной форме. Поэтому приведем детали этого представления для различных потенциалов. Установим ряд полезных соотношений для операторов рождения и уничтожения. Пусть операторы a_j^+ и a_j^- удовлетворяют коммутационным соотношениям (3.14). Тогда для этих операторов выполняется следующее стандартное тождество:

$$e^{i\vec{k}\vec{a}} e^{i\vec{p}\vec{a}^+} = e^{i\vec{p}\vec{a}^+} e^{i\vec{k}\vec{a}} \cdot e^{-(kp)}, \quad (\text{A.1})$$

где \vec{k} и \vec{p} - векторы в d – мерном пространстве.

Рассмотрим выражение

$$Y_j(\vec{k}) = e^{i\vec{k}\vec{a}} a_j^+ e^{-i\vec{k}\vec{a}}. \quad (\text{A.2})$$

При $\vec{k} = 0$ из (A.2) имеем:

$$Y_j(0) = a_j^+. \quad (\text{A.3})$$

Учитывая (A3), из (A.2) для $dY_j(\vec{k})/dk_l$ получаем:

$$\frac{dY_j(\vec{k})}{dk_l} = e^{i\vec{k}\vec{a}} \left[a_l, a_j^+ \right] e^{-i\vec{k}\vec{a}} = i\delta_{jl}. \quad (\text{A.4})$$

Проводя интегрирование по k_l , и, учитывая (A.3), имеем:

$$Y_j(\vec{k}) = e^{i\vec{k}\vec{a}} a_j^+ e^{-i\vec{k}\vec{a}} = a_j^+ + ik_j. \quad (\text{A.5})$$

Аналогично можно установить соотношения:

$$e^{-i\bar{p}\bar{a}^+} a_j e^{i\bar{p}\bar{a}^+} = a_j + i p_j,$$

$$e^{\alpha\bar{a}^+ \bar{a}} a_j e^{-\alpha\bar{a}^+ \bar{a}} = a_j e^{-\alpha}, \quad (\text{A.6})$$

$$e^{\alpha\bar{a}^+ \bar{a}} a_j^+ e^{-\alpha\bar{a}^+ \bar{a}} = a_j^+ e^{\alpha}.$$

Используя эти соотношения представим в нормальной форме различные виды потенциалов взаимодействия. Рассмотрим детали представления конкретных видов потенциалов в нормальной форме:

а) растущий потенциал

$$\begin{aligned} q^{2n} &= (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \cdot e^{-xq^2} \Big|_{x=0} = \\ &= (-1)^n \frac{d^n}{dx^n} \cdot \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x/\omega)} : e^{-2i\sqrt{x}(q\eta)} : \Big|_{x=0} \\ &= \frac{1}{\omega^n} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+n\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} + : q^2 : \frac{n}{\omega^{n-1}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+n\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)} + \\ &+ \frac{(-1)^n}{\omega^n} \frac{d^n}{dx^n} \cdot \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} : e_{-2i\sqrt{x\omega}(q\eta)} : \Big|_{x=0}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

где $n = 1, 2, \dots$ является целым и положительным,

б) степенной потенциал:

$$\begin{aligned}
q^{2\tau} &= \int_0^{\infty} \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} x^{-1-\tau} \cdot e^{-xq^2} = \\
&= \int_0^{\infty} \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} x^{-1-\tau} \cdot \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x/\omega)} : e^{-2i\sqrt{x}(q\eta)} := \\
&= \frac{1}{\omega^\tau} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+\tau\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} + : q^2 : \frac{\tau}{\omega^{\tau-1}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+\tau\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)} + \\
&+ \frac{1}{\omega^\tau} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} x^{-1-\tau} \cdot \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} : e^{-2i\sqrt{x\omega}(q\eta)} :, \tag{A.8}
\end{aligned}$$

где $\tau \neq n$ и использованы обозначения $e_2^x = e^x - 1 - x - x^2/2$.

с) В общем случае для потенциала мы будем использовать Фурье преобразование:

$$\begin{aligned}
W(q^2) &= \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) e^{i(kq)} \\
&= \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp\left(ik \frac{a+a^+}{\sqrt{2\omega}} \right) = \\
&= \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega} \right) \exp\left(ik \frac{a^+}{\sqrt{2\omega}} \right) \exp\left(ik \frac{a}{\sqrt{2\omega}} \right) \\
&= \int \left(\frac{dk}{2\pi} \right)^d \tilde{W}(k^2) \exp\left(-\frac{k^2}{4\omega} \right) : \exp(ikq) : . \tag{A.9}
\end{aligned}$$

Здесь $(kq) = \sum k_j q_j$ и

$$\tilde{W}(k^2) = \int (dx)^d W(x^2) e^{i(kx)}.$$

С помощью этих соотношений, которые приведены в формулах (A.7-A.9), определяются нормальные формы различных потенциалов. В частности, из (A.7) получаем для $n = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned}
q^2 &= \frac{d}{2\omega} + :q^2:; \\
q^4 &= \frac{d(d+2)}{4\omega^2} + \frac{d+2}{\omega} :q^2: + :q^4:; \\
q^6 &= \frac{d(d+2)(d+4)}{8\omega^3} + \frac{3(d+2)(d+4)}{4\omega^2} :q^2: + \\
&+ \frac{3(d+4)}{2\omega} :q^4: + :q^6:.
\end{aligned}
\tag{A. 10}$$

Некоторые детали вычисления для различных потенциалов.

В этом пункте представим некоторые детали вычисления для различных потенциалов.

Рассмотрим следующую величину

$$I = \frac{q^2}{\sqrt{q^4 + 2\gamma x q^2 + \gamma^2}} = - \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}} e^{-\beta q^2 - t(q^4 + 2\gamma x q^2 + \gamma^2)} \Big|_{\beta=0} \quad (\text{B.1})$$

где q_j вектор во вспомогательном пространстве R^d . Учитывая соотношения

$$e^{-tq^4} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tau}{\sqrt{\pi}} e^{-\tau^2 - 2i\sqrt{t}\tau q^2}; \quad (\text{B.2})$$

$$e^{-q^2 k} = \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2 - 2i\sqrt{k}(q\eta)}; \quad q_j, \eta_j \in R^d,$$

подставляя (B.1) в (B.2) и используя выражения (3.14) для канонической переменной q_j , проведем нормальное упорядочивание по операторам рождения a_j^+ и уничтожения a_j . В результате имеем

$$I = - \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty \frac{dt}{\sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\gamma^2 t\right\} \int_0^\infty \frac{d\tau}{\sqrt{\pi}} e^{-\tau^2} * \quad (\text{B.3})$$

$$* \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d \exp\left\{-\eta^2 \left(1 + \frac{k}{\omega}\right)\right\}; e^{-2i\sqrt{k}(q\eta)} : \Big|_{\beta=0},$$

где

$$k = \beta + 2\gamma x t + 2i\sqrt{t} \quad (\text{B.4})$$

Используя представление (B.3), мы получим выражение для $\varepsilon_0(E)$ энергии основного состояния (3.17) и выражение для H_I гамильтониана взаимодействия (3.18), соответственно.

При анализе гамильтониана с квазипараболическим потенциалом нам необходимо представить в нормальной форме величину $q^{2\tau}$, где τ принимает любые значения. Для этого используем соотношение

$$\begin{aligned}
 q^{2\tau} &= \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} x^{-1-\tau} e^{-xq^2} = \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} x^{-1-\tau} \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d * \\
 * e^{-\eta^2 \left(1 + \frac{x}{\omega} \right)} : e^{-2i\sqrt{x}(q\eta)} &:= \frac{1}{\omega^\tau} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} + \tau\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} + : q^2 : * \\
 * \frac{\tau}{\omega^{\tau-1}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} + \tau\right)}{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)} &+ \frac{1}{\omega^\tau} \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(-\tau)} \cdot x^{-1-\tau} \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d * \\
 * e^{-\eta^2(1+x)} : e_2^{-2i\sqrt{x\omega}(q\eta)} &:.
 \end{aligned} \tag{B5}$$

Теперь изложим детали вычисления интегралов следующего вида

$$J = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \frac{(\beta_1 \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2) e^{-\omega_1 \beta_1 + \omega_2 \beta_2}}{\sqrt{S^2 R^2 - 2SR(\beta_1 - \beta_2) + (\beta_1 + \beta_2)^2}} \tag{B.6}$$

После замены переменных, представленной в (3.20), интеграл (B.6) записывается в виде

$$J = \frac{\gamma^d}{2^{d-1}} \int_0^\infty dt \int_{-1}^1 dx \cdot \frac{(1-x^2)^{d/2-1} t^d}{\Gamma^2(d/2)} \cdot \frac{e^{-\omega t SR - \omega x t SR \gamma}}{\sqrt{1-2xt+t^2}}, \tag{B.7}$$

Далее, для вычисления интеграла (B.7) будем использовать следующие соотношения

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{k=0}^\infty \begin{cases} t^k P_k(x), & |t| \leq 1; \\ t^{-1-k} P_k(x), & |t| \geq 1; \end{cases}$$

и

$$\int_{-1}^1 dx x^{2j} P_{2k}(x) = \frac{\Gamma(j+1)}{\Gamma(1+j-k)} \cdot \frac{\Gamma(1/2+j)}{\Gamma(k+3/2+j)} \quad (\text{B.8})$$

Здесь $P_{2k}(x)$ - полином Лежандра. Учитывая эти представления, получим из (B.7)

$$J = \frac{(SR)^{2(|m|+1)}}{2^{2|m|+1}} \cdot \sum_{j=0}^{|m|} \frac{(-1)^j}{|m|!(|m|-j)!} \cdot \sum_{k=0}^j \left\{ \int_0^1 dt e^{-\omega t} * \right. \\ \left. * \left(t^{2|m|+2+2k} - t^{2|m|-2k+1} \right) + \frac{\Gamma(2|m|-2k+2)}{(SR\omega)^{2(|m|+1-k)}} \right\} * \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+j\right)}{\Gamma(1+j-k)! \Gamma\left(k+\frac{3}{2}+j\right)}. \quad (\text{B.9})$$

Следующий интеграл вычисляется точно

$$\int_0^1 dt t^n e^{-At} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial A^n} \int_0^1 dt e^{-At} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial A^n} \frac{1-e^{-A}}{A}, \quad n=0,1, \dots \quad (\text{B.10})$$

Применяя эти соотношения, мы получаем выражения (3.21).

**More
Books!** 



yes
I want morebooks!

Покупайте Ваши книги быстро и без посредников он-лайн - в одном из самых быстрорастущих книжных он-лайн магазинов!
Мы используем экологически безопасную технологию "Печать-на-Заказ".

Покупайте Ваши книги на
www.morebooks.de

Buy your books fast and straightforward online - at one of the world's fastest growing online book stores! Environmentally sound due to Print-on-Demand technologies.

Buy your books online at
www.morebooks.de

OmniScriptum Marketing DEU GmbH
Bahnhofstr. 28
D - 66111 Saarbrücken
Telefax: +49 681 93 81 567-9

info@omniscrptum.com
www.omniscrptum.com

OMNIScriptum 