

СТАЦІОНАРНІ СТАНИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ В МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Понеділок Г. В., Клапчук М. І.

Національний університет “Львівська політехніка”
вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

(Отримано 8 лютого 2013 р.)

Запропоновано осциляторно-кулонівську модель сферичної квантової точки (СКТ) у зовнішньому однорідному магнітному полі. СКТ описується сферично-симетричним осциляторно-кулонівським потенціалом, що узагальнює відому параболічну модель квантової точки. Отримане трансцендентне рівняння для спектра електронів, вирази для відповідних власних функцій. Досліджено залежність спектра одноелектронної задачі від ефективного розміру квантової точки та інших параметрів модельного потенціалу. Побудовано залежність одноелектронних станів СКТ у магнітному полі від циклотронної частоти ω_c/ω_0 .

Ключові слова: сферична квантова точка, магнітне поле.

PACS: 73.22.-f, 73.21.La, 73.22.Dj.

УДК: 517.9

Вступ

Сучасний стрімкий прогрес у напівпровідниковій технології дає змогу створювати настільки малі структури, що можуть містити лише невелику кількість електронів. Ці структури, обмежені у тривимірному нанопросторі, називають квантовими точками (КТ) або штучними атомами (ША) [1, 2]. Типовий розмір КТ є порядку 100 нм і кожна з них може містити від 2 до 200 електронів. Спроби зрозуміти і пояснити ефекти кореляції електронів у таких системах спричинили появу великої кількості теоретичних робіт. Особлива увага при цьому зосереджена на поясненні магнітних властивостей КТ [3–5].

На відміну від звичайних атомів, властивості КТ (розмір і форма потенціалу конфайнменту, кількість та ефективна маса електронів) істотно відрізняються, до цього часу не встановлено умови, за яких КТ можуть мати власний магнітний момент. Відсутнія також загальновизнана теорія, яка б описувала стани довільних КТ у зовнішніх магнітних полях. Зокрема у ранніх 1990-х роках було виміряно магнітну сприйнятливість ансамблю ізольованих КТ *GaAs* і знайдено велику парамагнітну сприйнятливість, пізніше було зауважено, що ця величина змінюється залежно від розмірів КТ. У роботі [6] враховано і орбітальні, і спінові магнітні властивості КТ *GaAs*, показано, що парамагнітний спіновий внесок у намагніченість КТ наявний при низьких температурах і полях, а при високих температурах і полях переважає діамагнітний орбітальний внесок. Подібний ефект спостерігається для КТ *PbSe* [7]. У недавній роботі [8] показано ефект формування зв’язаних кількаелектронних станів у магнітному полі, які за відсутності магнітного поля є незв’язаними. У [9] виявлено новий фізичний ефект – осциляції орбітального магнітного

моменту у схрещених магнітному і електричному полях.

У випадку великих КТ необхідним є врахування електрон-електронної взаємодії, що показує всю складність розрахунку електронного спектра [10, 5, 12]. У зв’язку з цим активно розвиваються інші альтернативні способи розрахунку багатоелектронної задачі, зокрема в роботі [13], розвинuto варіаційний метод обчислення станів КТ у сильних магнітних полях.

Як досліджено в роботі [10], у випадку квадратичного потенціалу конфайнменту багаточастинкова система має такі ж властивості, як і в одноелектронному випадку. Тому першим кроком в розумінні властивостей цих систем є знаходження квантових станів одноелектронної задачі. Орбітальний магнетизм для малих КТ вивчали в роботах [14, 15], тут електрон-електронна взаємодія виконує функцію слабкого збурення. Можна розглядати електрон в полі потенціалу, який переважно обирається параболічним (що спрощує обчислення), але є реалістичним тільки для деяких електростатичних КТ [17]. У межах макроскопічного підходу у роботі [16] отримано спектр і хвильові функції домішкового електрона у СКТ у середовищі з різною ефективною масою та величинами діелектричної проникливості у різних середовищах, показано добре узгодження з експериментальними даними для малих КТ *CdS*, вміщених у силікатне скло.

У роботі пропонується нова узагальнена осциляторно-кулонівська модель СКТ [11]. Приймається, що всередині нанокулі є томсонівський осциляторний потенціал, а на великих віддалях потенціал має кулонівський характер. Такий потенціал, уперше введений З. Флюгге, пізніше був успішно застосований для опису енергетичних рівнів мезоатомів [21], де

враховувався скінченний об'єм їх ядра. У запропонованій моделі приймається, що заряд рівномірно розподілений по скінченному об'єму радіуса R , тому електронні рівні зсуваються вверх (послаблення взаємодії) порівняно з очікуваними значеннями для точкової КТ [18]. Покажемо, що врахування розмірів нанокулі є найвагомішим для s -рівнів, і менше впливає на p -рівні.

Отримано трансцендентне рівняння для визначення енергетичних рівнів електрона та вираз для радіальної хвильової функції системи. Проводяться чисельні розрахунки електронних енергетичних рівнів, електронної функції розподілу для різних значень радіуса R і різних значень орбітального квантового числа. Включення зовнішнього магнітного однорідного поля призводить до перенормування характеристичної довжини $l_B = (\hbar/m\Omega)^{1/2}$ з частотою $\Omega = (\omega_0^2 + 1/4\omega_c^2)^{1/2}$. При зростанні H характеристична довжина зменшується, тобто конфайнмент є сильнішим для більших значень величини H . Побудовано залежність одноелектронних станів КТ у магнітному полі від циклотронної частоти ω_c/ω_0 .

I. Модель сферичної квантової точки. Теорія збурення

Розглядається електрон в полі сферично-симетричного потенціалу:

$$V_0(r) = \begin{cases} \frac{Ze^2}{2R^3}(r^2 - 3R^2), & r \leq R \\ -\frac{\alpha}{r}, & r \geq R, \end{cases} \quad (1)$$

де при $r \rightarrow 0$, $\lim_{r \rightarrow 0} V_0(r) = -\frac{3}{2} \frac{Ze^2}{R} = -V_0$. Тут $V_0, \alpha > 0$ – додатні константи. Для наносфери, що має радіус R і позитивний заряд $Z|e|$, $\alpha = Ze^2$ з умовою, що електростатичний потенціал $V(r)$ є неперервним при $r = R$. Для спрощення, в (1) не враховується вплив середовища, інакше кажучи, електрон в полі сферично-симетричного потенціалу розглядається у вакуумі.

Хоча ця потенціальна енергія має доволі простий аналітичний вигляд і не має особливостей, розв'язати точно рівняння Шредінгера для електрона у потенціальному полі (1) не можливо. Звернемо увагу тут на певні апроксимації та наближені схеми, які можна застосувати під час дослідження реальних об'єктів.

A Деформований водневоподібний потенціал

Розглянемо незбурену задачу про рух електрона в полі точкового ядра ($R = 0$). У цьому випадку маємо кулонівський потенціал всходи

$$V_0(r) = \frac{-Ze^2}{r}, \quad 0 \leq r < \infty,$$

$$\Phi_0(r) = \frac{\gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\gamma r}, \quad \gamma = Z \frac{me^2}{\hbar^2},$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} Z^2 \frac{me^4}{\hbar^2}.$$

Тут відповідно хвильова функція і енергія основного стану водневої задачі. Поправки на рівномірний просторовий розподіл додатного заряду всередині квантової ями будемо визначати за теорією збурень, приймаючи за потенціальну енергію збурення вираз

$$V - V_0 = \begin{cases} \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right), & r \leq R \\ 0, & r \geq R, \end{cases}$$

За такого вибору потенціалу збурення допускається істотне наближення, коли нехтується дією осциляторного потенціалу поза межами квантової точки. Поправка для енергетичного рівня матиме вигляд:

$$\Delta E = E - E_0 = \int \Phi_0^2 (V - V_0) d\tau =$$

$$= 4\pi \int_0^R r^2 \frac{\gamma^3}{\pi} e^{-2\gamma r} \frac{Ze^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} + \frac{R}{r} \right) dr.$$

Після інтегрування отримаємо

$$\Delta E = \frac{4}{5} Z^2 |E_0| \left(\frac{R}{a_0} \right)^2,$$

$a_0 = \hbar^2/(me^2)$ – борівський радіус.

B Параболічний конфайнмент

У цьому випадку нехтується притягувальним кулонівським потенціалом, який діє на віддалах $r \geq R$, а потенціальна енергія замінюється просторовим осциляторним потенціалом

$$V_0(r) = \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2),$$

для якого хвильова функція основного стану має вигляд

$$\Phi_0(r) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{3/2} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2},$$

де

$$\omega^2 = \frac{Ze^2}{mR^3},$$

а відповідна енергія

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar\omega - \frac{3Ze^2}{2R}.$$

Таке наближення, де в якості незбуреної задачі розглядається розв'язок для безмежно протяжного осциляторного потенціалу, а збуренням вважається

різниця між кулонівським та осциляторним потенціалом зовні ядра, є застосовним для квантових точок з великим значенням Z .

$$V - V_0 = \begin{cases} \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R^3} (r^2 - 3R^2), & r \geq R \\ 0, & r \leq R, \end{cases}$$

$$\Delta E = -\frac{4Ze^2}{\pi^2 r_0^4} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \left[\frac{1}{10} - \frac{3}{140} \left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right]$$

II. Розв'язок рівняння Шредінгера для СКТ методом зшивання хвильових функцій на границі напокуля

a) Розглянемо область $r \leq R$.

Введемо позначення для характерної довжини ρ та енергії ϵ :

$$\rho = \frac{r}{r_0}, \quad r_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}},$$

$$\epsilon = \frac{E}{E_0}, \quad E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2},$$

де $\omega_0^2 = \frac{ze^2}{mR^3}$.

Радіальне рівняння Шредінгера в полі потенціалу (1), матиме вигляд

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d^2}{dr^2} (r\Phi(r)) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \Phi(r) + V_0(r)\Phi(r) = E\Phi(r). \quad (2)$$

Використавши введені позначення, отримаємо знерозмірене рівняння Шредінгера для області $r \leq R$

$$\frac{d^2\Phi^<(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d\Phi^<(\rho)}{d\rho} +$$

$$+ \left(-\frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho^2 + 3 \left(\frac{R}{r_0}\right)^2 + \epsilon \right) \Phi^<(\rho) = 0. \quad (3)$$

Розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\Phi^<(\rho) = \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} \omega(\rho),$$

де невідома функція $\omega(\rho)$ задовольняє рівняння

$$\omega''(\rho) + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - \rho \right) \omega'(\rho) +$$

де

$$M(a, b, \frac{R}{r_0}) = M \left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 \right).$$

Умови неперервності хвильових функцій (7) і (8), а також їх перших похідних на границі $r = R$:

$$\Phi^<(R) = \Phi^>(R); \quad \Phi'^<(R) = \Phi'^>(R). \quad (9)$$

Тоді з рівності (7) і (8) знайдемо співвідношення для коефіцієнтів

$$B_l = \frac{A_l e^{\chi R} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2} M\left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right)}{(xr_0)^l U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)}. \quad (10)$$

Вирази для похідних від хвильових функцій при $r = R$:

$$\Phi^{>'}(R) = B_l(\chi R)^l e^{-\chi R} \left\{ \left(\frac{l}{R} - \chi \right) U + 2\chi U' \right\},$$

$$\Phi^{<'}(R) = A_l \left(\frac{R}{r_0} \right)^l e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2} \left\{ \left(\frac{l}{R} - \frac{R}{r_0^2} \right) M + \frac{2R}{r_0^2} M' \right\},$$

тут аргументи гіпергеометричних функцій опущено для компактності запису.

Тепер з системи (9) знайдемо трансцендентне рівняння для визначення енергетичних рівнів:

$$\frac{2R}{r_0^2} \frac{M'\left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right)}{M\left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right)} - 2\chi \frac{U'(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)}{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)} + \chi - \frac{R}{r_0^2} = 0. \quad (11)$$

Хвильову радіальну функцію системи можна подати за допомогою функції Хевіайда так:

$$\Phi(r) = C \left\{ \Theta(R-r) \left(\frac{r}{r_0} \right)^l e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r^2-R^2}{r_0^2}\right)} \frac{M\left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right)}{\left(\frac{R}{r_0}\right)^l M\left(\frac{1}{4}\epsilon - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right), l + \frac{3}{2}, \left(\frac{R}{r_0}\right)^2\right)} \right\} +$$

$$+ C \left\{ \Theta(r-R) e^{-\chi(r-R)} \left(\frac{r}{R} \right)^l \frac{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi r)}{U(l+1-\lambda, 2l+2, 2\chi R)} \right\}, \quad (12)$$

де стала C знаходиться з умови нормування

$$\int_0^{+\infty} dr r^2 \Phi^2(r) = 1. \quad (13)$$

A Рівняння для енергетичних рівнів електрона і хвильова функція системи

Розглянемо випадок, коли потенціал (1) співпадає з скалярним потенціалом зарядженої кулі при $Z = 1$. Використаємо одиниці вимірювання енергії в рідбергах і віддалі в одиницях радіуса Бора, тобто

$$|E| = \frac{1}{2} \xi^2 E_a, \text{ i } R = \eta a_0, \quad (14)$$

де $E_a = \frac{me^4}{\hbar^2} = 2Ry = 27.21 \text{ eV}$ і $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.053 \text{ нм}$.

Оскільки η змінюється в межах $0 \leq \eta < +\infty$ і $|E| \leq V_0$, $V_0 = \frac{3}{2} \frac{Ze^2}{R}$, умова для ξ :

$$0 \leq \xi \leq \sqrt{\frac{3}{\eta}}.$$

Підставимо ці позначення в дисперсійне співвід-

ношення (11), тоді

$$\frac{2}{\xi\sqrt{\eta}} \frac{M'\left(\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)}{M\left(\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)} -$$

$$- 2 \frac{U'(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)}{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)} + 1 - \frac{1}{\xi\sqrt{\eta}} = 0. \quad (15)$$

Використаємо відомі правила диференціювання для гіпергеометричних функцій $M(a, b, x)$ $U(a, b, x)$ [20]:

$$\frac{U'(a, b, x)}{U(a, b, x)} = 1 - \frac{U(a, b+1, x)}{u(a, b, x)};$$

$$\frac{M'(a, b, x)}{M(a, b, x)} = 1 + \frac{a-b}{b} \frac{M(a, b+1, x)}{M(a, b, x)}.$$

Тоді рівняння для визначення енергетичних рівнів матиме вигляд

$$\frac{2}{\xi\sqrt{\eta}} \left(1 - \frac{\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta})}{l + \frac{3}{2}} \right) \frac{M\left(\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{5}{2}, \sqrt{\eta}\right)}{M\left(\frac{1}{4}\xi^2\eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)} -$$

$$- 2 \frac{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+3, 2\xi\eta)}{U(l+1-\xi^{-1}, 2l+2, 2\xi\eta)} + 1 - \frac{1}{\xi\sqrt{\eta}} = 0. \quad (16)$$

Цікаво зауважити, що в цій системі немає випадкового виродження енергетичних рівнів, що істотно відрізняє її від випадку "чистого" кулонівського потенціалу (атом водню). Параметр ξ є функцією радіуса η нанокулі. Цей параметр також залежить від

квантового числа l і радіального квантового числа $n_r = 0, 1, 2, 3, \dots$:

$$\xi = \xi_{l,n_r}(\eta). \quad (17)$$

Повна радіальна хвильова функція системи (12):

$$\Phi_{l,n_r}(\rho) = a_0^{-3/2} C_{l,n_r} \begin{cases} \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l e^{-\frac{\sqrt{\eta}}{2}((\frac{\rho}{\eta})^2 - 1)} \frac{M\left(\frac{1}{4}\xi_{l,n_r}^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{3}{2}, \frac{\rho^2}{\sqrt{\eta^3}}\right)}{M\left(\frac{1}{4}\xi_{l,n_r}^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}), l + \frac{3}{2}, \sqrt{\eta}\right)}, & \rho < \eta, \\ \left(\frac{\rho}{\eta}\right)^l \frac{e^{-\xi_{l,n_r}\rho} U(l + 1 - \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l + 1, 2\xi_{l,n_r}\rho)}{e^{-\eta\xi_{l,n_r}} U(l + 1 - \xi_{l,n_r}^{-1}, 2l + 1, 2\xi_{l,n_r}\eta)}, & \rho > \eta, \end{cases} \quad (18)$$

що відповідає значенням енергії

$$E_{l,n_r} = -\xi_{l,n_r}^2 Ry \quad (19)$$

тут введено позначення $\rho = r/a_0$ в одиницях радіуса Бора.

Константа C_{l,n_r} визначається з умови нормування:

$$C_{l,n_r}^{-2} = \int_0^\eta d\rho \rho^2 \{\Phi^<(\rho)\}^2 + \int_\eta^{+\infty} d\rho \rho^2 \{\Phi^>(\rho)\}^2.$$

B Границі випадки

Обговоримо обидва граничні випадки і покажемо узгодження з відомими результатами: при $\eta \rightarrow 0$ ($R \rightarrow 0$) отримаємо розв'язок водневої задачі, при $\eta \rightarrow \infty$ ($R \rightarrow \infty$) отримаємо випадок просторового гармонічного осцилятора.

1) $\eta \rightarrow 0$ ($R \rightarrow 0$). Обчислимо закон дисперсії (16) та хвильову функцію (18) системи в границі $\eta \rightarrow 0$, що відповідає кулонівському потенціалу в (1) при $R = 0$.

Використаємо відомі вирази для гіпергеометричних функцій $M(a, b, z)$ та $U(a, b, z)$ при $z \rightarrow 0$ і $b > 2$ [20]:

$$\begin{aligned} M(a, b, z) &\rightarrow 1, \\ U(a, b, z) &\rightarrow \frac{\Gamma(b-1)}{\Gamma(a)} z^{1-b}. \end{aligned} \quad (20)$$

Тоді дисперсійне співвідношення (16) виконується лише за умови

$$\frac{1}{\Gamma(l+1-\xi^{-1})} = 0. \quad (21)$$

Беручи до уваги той факт, що полюси Γ -функції існують тільки для від'ємних цілих значень [20], ми отримаємо $l+1-\xi^{-1} = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$) з рівняння (21), звідки розв'язок (17) при $\eta \rightarrow 0$ знайдемо у вигляді

$$\xi_{l,n_r}(0) = \frac{1}{n_r + l + 1}. \quad (22)$$

Підставивши це співвідношення в рівняння (19), ми остаточно отримаємо спектр водневого атома

$$E_{l,n_r} = -\frac{Ry}{(n_r + l + 1)^2}. \quad (23)$$

Враховуючи (22), знайдемо границю $\eta \rightarrow 0$ у випадку для хвильової функції системи (18), отримаємо координатно-залежну частину хвильової функції

$$\Phi(\rho) \sim \rho^l e^{-\xi\rho} u(-n_r, 2l + 2, 2\xi\rho).$$

Використавши вираз для функції $U(-n, \alpha + 1, x) = (-1)^n n! L_n^{(\alpha)}(x)$ в термінах поліномів Лаггера для $n = 0, 1, 2, \dots$, отримаємо радіальну хвильову функцію атома водню [23]. Зауважимо, що при заміні $\xi \rightarrow Z\xi$ і $\eta \rightarrow Z^{-1}\eta$, можна узагальнити ці результати для випадку $Z \neq 1$.

2) $\eta \rightarrow \infty$ ($R \rightarrow \infty$). Розглянемо інший граничний випадок. Асимптотичні вирази для гіпергеометричних функцій при $z \rightarrow +\infty$, $b > 2$ [20]

$$\begin{aligned} M(a, b, z) &\rightarrow \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-b}, \\ U(a, b, z) &\rightarrow z^{-a}. \end{aligned} \quad (24)$$

Тоді з дисперсійного співвідношення (16) отримаємо

$$\frac{1}{\Gamma(\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}))} = 0,$$

звідки $\frac{1}{4}\xi^2 \eta^{3/2} - \frac{1}{2}(l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\sqrt{\eta}) = -n_r$ ($n_r = 0, 1, 2, \dots$).

Остаточно спектр просторового гармонійного осцилятора такий:

$$\begin{aligned} E_{l,n_r} &= \hbar\omega_0 \left(2n_r + l + \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{R}{r_0} \right)^2 \right) = \\ &= \hbar\omega_0 \left(N + \frac{3}{2} - \frac{3 Ze^2}{2R} \right). \end{aligned}$$

У граничному випадку $\eta \rightarrow +\infty$ із врахуванням вигляду енергетичного спектра, отримаємо координатно-залежну частину хвильової функції

$$\Phi(\rho) \sim \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} M(-n_r, l + \frac{3}{2}, \rho^2),$$

де $\rho = \frac{r}{r_0}$.

Взявши до уваги відомий зв'язок між гіпергеометричною функцією та поліномами Лаггера [20]

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n! \Gamma(\alpha + 1)} M(-n, \alpha + 1, x),$$

де

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \left(\frac{d}{dx} \right)^n x^{n+\alpha} e^{-x}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

отримаємо радіальну функцію просторового гармонійного осцилятора [23]

$$\Phi(\rho) \sim \frac{\Gamma(l + \frac{3}{2})}{\Gamma(n_r + l + \frac{3}{2})} \rho^l e^{-\frac{1}{2}\rho^2} L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(\rho^2).$$

C Чисельні розрахунки

У цьому розділі проаналізуємо електронні енергетичні рівні та електронну функцію розподілу для різних значень радіуса нанокулі. Значення енергії $\xi_{l,n_r}(\eta)$ отримано із розв'язку рівняння (16). Енергію електрона знайдено з (19), значення енергії зв'язку є порядку $10^{-2} Ry$.

На рис. 1 наведено залежність енергії основного стану $\xi_{0,0}(\eta)$ від радіуса КТ η . Наприклад, $\xi_{0,0}(0) = 1$ для атома водню ($\eta = 0$) і $\xi_{0,0}(\eta)$ при $\eta = 50(R = 2.65nm)$, $\eta = 100(R = 5.3nm)$, $\eta = 150(R = 7.95nm)$, $\eta = 200(R = 10.6nm)$ для нанокулі відповідного радіуса.

Узагальнивши отримані результати для випадку $Z \neq 1$, бачимо з рис. 2, що вплив розмірів і форми нанокулі сильно позначається на положенні енергетичного рівня при зростанні Z . Так, для $Z = 1, \eta = 1, \xi = 0.8775$, а для $Z = 2, \eta = 1, \xi = 0.5899$. Вже при $Z = 3$ енергія s -рівня вдвічі менша, ніж для випадку точкового атома. Для $\eta = 50$

$$\begin{aligned} \xi &= 0.16056, \quad Z = 1; \\ \xi &= 0.10791, \quad Z = 2; \\ \xi &= 0.08516, \quad Z = 3. \end{aligned}$$

Обраний потенціал має ту перевагу, що дозволяє здійснювати неперервний перехід від його кулонівської частини до гармонічної, змінюючи лише величину радіуса зарядженої кулі η . На рис. 3 показано зміну одноелектронного енергетичного спектра із зміною радіуса КТ. Для області значень $0 < \eta < 1$ енергетичний спектр є водневоподібним. При зростанні радіуса, енергетичні рівні зміщуються. Це зміщення є найстотнішим для станів s -симетрії. Бачимо, що із збільшенням радіуса, енергетичні рівні стають еквідистантними. Більше того, перший збуджений стан є p -симетрії, другий збуджений стан відповідає виродженням $2s$ і $3d$ станам. Отже, спектр водневої задачі переходить в спектр гармонічного осцилятора у разі зростання радіуса КТ.

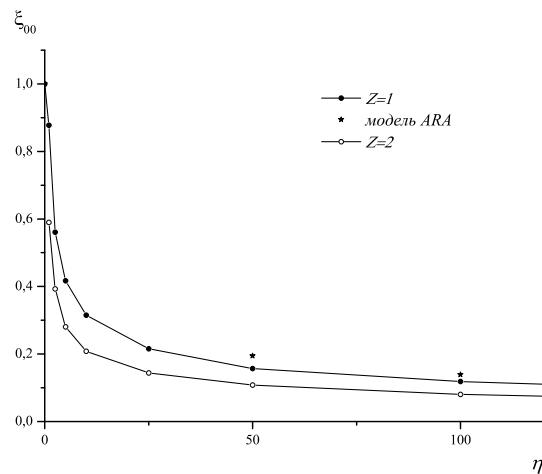


Рис. 1. Залежність енергії основного стану $\xi_{0,0}(\eta)$ від радіуса нанокулі η . Для порівняння показано * – результати, отримані в моделі ARA [18]

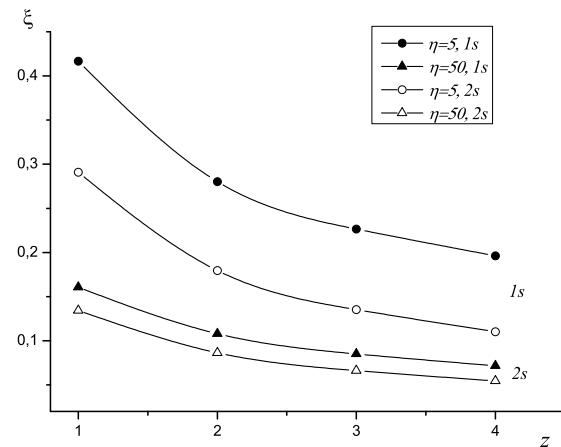


Рис. 2. Зміна s -симетричних станів зі зміною заряду нанокулі Z для $\eta=5$, $\eta=50$

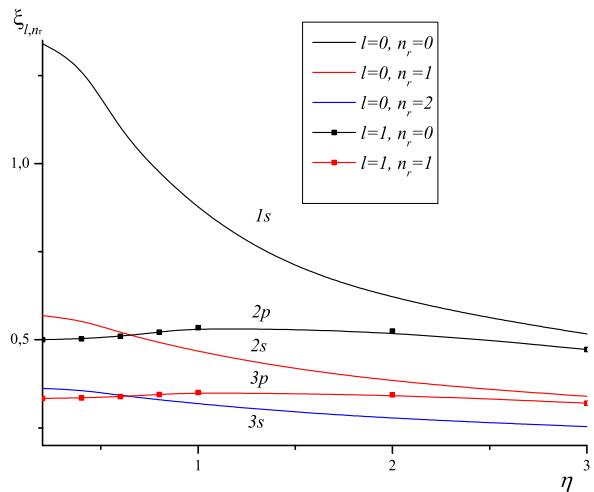


Рис. 3. Залежність енергії $\xi_{l,n_r}(\eta)$ від радіуса η

Наші результати узгоджуються з даними роботи [24], у якій одноелектронний енергетичний спектр отримано із розв'язку рівняння Шредінгера методом Хартрі-Фока [25] для водневоподібного спектра іона Ne^{9+} .

У роботі [24] також показано, що за збільшення радіуса КТ, ймовірність знайти частинку поза її межами зменшується (це становить 28 % для $\eta = 0,5$ і 12% для $\eta = 1$, відповідно). Це означає, що для доволі великих радіусів нанокулі електрон відчуває тільки томсонівський осциляторний потенціал, тобто лише параболічну частину потенціалу (1). Цей ефект справджується і для хвильових функцій збуджених станів.

Функція $\xi_{l,n_r}(\eta)$ є монотонно спадною функцією η . Можна зауважити з рис. 3, що енергетичні рівні при великих значеннях η є строго впорядкованими для кожного фіксованого радіуса нанокулі. А саме,

$$E_{0,n_r} < E_{1,n_r} < E_{2,n_r} < \dots < E_{0,n_r+1} < E_{1,n_r+1} < E_{2,n_r+1} < \dots$$

Отже, тут немає випадкового виродження, що має місце у випадку чистого кулонівського потенціалу (точковий атом).

III. Сферична квантова точка у магнітному полі

A Гамільтоніан моделі

Розглянемо сферичну квантову точку у зовнішньому магнітному однорідному полі, яке спрямоване вздовж осі Oz , тобто $\mathbf{H}(x, y, z) = \mathbf{H}(0, 0, H)$, де H – напруженість поля.

Розглянемо спочатку модель параболічного конфайнменту. Класична функція гамільтона для окремого електрона задається формулою

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} (x^2 + y^2) + \frac{m\omega_0^2}{2} z^2, \quad (25)$$

де \mathbf{p} – вектор імпульсу електрона, а $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – векторний потенціал. Тут ми завчасно виділили складову потенціальної енергії, що характеризує рух електрона у площині x, y та рух електрона у напрямку осі Oz .

Врахувавши, що квадрат узагальненого імпульсу осцилятора

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \mathbf{p}^2 + \frac{i\hbar e}{c} \operatorname{div} \mathbf{A} - \frac{e}{mc} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2,$$

оператор Гамільтона просторового осцилятора у зовнішньому полі

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\mathbf{H} \cdot \mathbf{L}) + \frac{e^2 H^2}{8mc^2} (x^2 + y^2) + \frac{m\omega_0^2}{2} (x^2 + y^2) + \frac{m\omega_0^2}{2} z^2 - \frac{3m\omega_0^2}{2} R^2, \quad (26)$$

тут $\mathbf{L} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ – оператор орбітального моменту імпульсу осцилятора. Переформатуємо оператор Га-

мільтона до вигляду, зручному для подальшого аналізу. Насамперед, подамо його у формі суми двох комутуючих доданків

$$H = H_{xy} + H_z.$$

Оператор

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (z^2 - 3R^2)$$

описує одномірний просторовий осцилятор і характеризує рух електрона вздовж декартової осі Oz . Доданок H_{xy} в операторі Гамільтона

$$H_{xy} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} - \frac{eH}{2mc} L_z + \left(\frac{e^2 H^2}{8mc^2} + \frac{m\omega^2}{2} \right) (x^2 + y^2)$$

відповідає енергії осцилятора, пов'язаній із рухом у площині xOy .

Як і у класичному випадку, рух осцилятора у площині xOy зручно описувати полярними координатами $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$, де полярний кут змінюється у межах $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Оператор H_{xy} у полярній системі координат

$$H_{xy} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - i \frac{|e|\hbar H}{2mc} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \left[\frac{e^2 H^2}{8mc^2} + \frac{m\omega_0^2}{2} \right] r^2$$

Як і у класичній задачі, тут також виникає характеристична постійна $\omega_c = \frac{|e|H}{mc}$ – циклотронна частота. Остаточно оператор Гамільтона

$$H_{xy} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - i \frac{\hbar\omega_c}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m}{2} \left(\frac{1}{4}\omega_c^2 + \omega_0^2 \right) r^2$$

Маючи тепер явні вирази для оператора енергії просторового осцилятора у координатному зображені, можна вже перейти до розв'язування задачі на власні значення та власні функції.

B Рівняння Шредінгера

A) Область $r \leq R$.

Оператори H_{xy} та H_z комутують між собою, тому вони мають спільну систему власних функцій. Вибираючи хвильову функцію у вигляді добутку $\Psi(x, y, z) = \Phi(x, y) \cdot X(z)$, а енергію осцилятора як суму енергій $E = E + \varepsilon$, приходимо до сукупності незалежних рівнянь

$$H_z X(z) = \varepsilon X(z),$$

$$H_{xy} \Phi(x, y) = E \Phi(x, y).$$

Перше рівняння описує стаціонарні стани одномірного гармонічного осцилятора. Спектром енергії є сукупність еквідистантних дискретних рівнів

$$\varepsilon_s = \hbar\omega_0 \left(s + \frac{1}{2} \right), \quad s = 0, 1, 2, \dots$$

Відповідні цьому спектру власні функції

$$X_s(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^s s \sqrt{\pi}}} H_s(\xi) \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right).$$

Тут координата $\xi = z \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$, а $H_s(\xi)$ – поліноми Ерміта, твірна функція для яких

$$H_s(\xi) = (-1)^s \exp(\xi^2) \frac{d^s}{d\xi^s} \exp(-\xi^2), \quad s = 0; 1; 2; \dots$$

Власну функцію стаціонарного рівняння Шредінера можна подати у вигляді добутку двох функцій

$$\Psi(r, \varphi) = \Phi(r)f(\varphi),$$

одна з яких залежить тільки від радіальної, а друга – від кутової змінної.

Цей аналітичний розв'язок для двовимірного випадку параболічного потенціалу відомий як стани Фока-Дарвіна [26]:

$$E_{n,l} = (2n + |l| + 1)\hbar(\omega_0^2 + 1/4\omega_c^2)^{1/2} + \frac{1}{2}l\hbar\omega_c,$$

з власними значеннями

$$E_{n,l} = E_{n,l}^0 - \frac{e\hbar H}{2m}l, \quad l = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$$

Використовуючи ту ж умову неперервності хвильових функцій та їх перших похідних на границі квантової точки (9), знаходимо чисельно розв'язки трансцендентного рівняння для визначення енергетичних станів квантової точки у магнітному полі. Результати наведені на рис. 4.

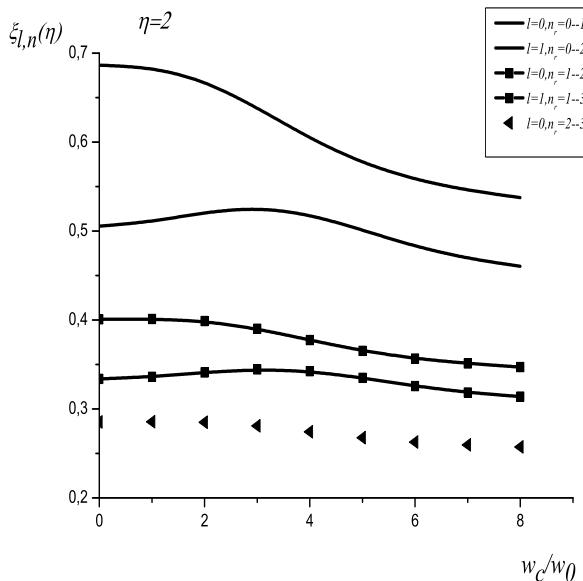


Рис. 4. Залежність енергії $\xi_{l,n}(\eta)$ від циклотронної частоти при $\eta = 2$

$$\Psi_{n,l}(r, \varphi) = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}l_B} \sqrt{\frac{n!}{(n+|l|)!}} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} \left(\frac{r}{\sqrt{2}l_B}\right)^{|l|} L_n^{|l|} \left(\frac{r^2}{2l_B^2}\right),$$

де характеристична довжина $l_B = (\hbar/m\Omega)^{1/2}$ з частою $\Omega = (\omega_0^2 + 1/4\omega_c^2)^{1/2}$. $L_n^{|l|}$ – узагальнені поліноми Лагерра. Циклотронна енергія $\hbar\omega_c$ для $GaAs$ становить 1.76 meV при 1T. Кожен стан $E_{n,l}$ двократно вироджений за спіном.

B) Область $r \geq R$.

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

$$H = H_0 - \frac{e}{2m}(\mathbf{H}\mathbf{L}) + \frac{e^2 H^2}{8m}(r \sin \varphi)^2$$

Оскільки останній діамагнітний доданок пропорційний квадрату магнітного поля, то ним можна знештувати. Власні значення та власні функції H_0 відомі. Оскільки оператори H_0 , \mathbf{L} , \mathbf{L}^2 взаємно комутують, то хвильові функції $\Phi_{n,l}$ будуть їх спільною системою власних функцій

$$\Phi_{n,l}(\rho) = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right)^l L_{n+1}^{2l+1} \left(\frac{2Z\rho}{n}\right) e^{-Z\rho/n}.$$

Висновки

На завершення зауважимо, що запропонована модель забезпечує точний розв'язок задачі про знаходження спектра та хвильових функцій електрона у сферичній квантовій точці. Модель застосовна для малих КТ, де кількість електронів є малою. Отримане трансцендентне рівняння для спектра залежить від розмірів та форми потенціалу конфайнменту. Показано, що при збільшенні радіуса КТ, розміри електронної хмари збільшуються, тоді як енергія основного та збуджених станів зменшується. Також показано, що вплив розмірів та форми нанокулі особливо сильно позначається на положенні енергетичних рівнів при зростанні її заряду Z . Ці параметри потенціалу можуть слугувати керуючими параметрами для оптимізації енергетичної структури сферичної квантової точки з метою отримання реальних структур із наперед заданими фізико-хімічними властивостями.

При зростанні H характеристична довжина зменшується, тобто конфайнмент є сильнішим для більших значень величини H . Побудовано залежність одноелектронних станів КТ у магнітному полі від циклотронної частоти ω_c/ω_0 .

Література

- [1] Reimann S.M., Manninen M. Electronic structure of quantum dots // Rev. Mod. Phys. – 2002. – v. 74. – p.1283.
- [2] Tarucha S. Quest for quantum computing// Japan nanonet bulletin – 13th Issue. – March 4, 2004.
- [3] Kouwenhoven L.P., Austing D.G., Tarucha S. Few-electron quantum dots // Rep. Prog. Phys. – 2001. – v.64. – p.701–736.
- [4] Ashoori R.C. Electrons in artificial atoms// Nature. – 1996. – v.379. – p.413–419.
- [5] Tokura Y., Kouwenhoven L.P., Austing D.G., Tarucha S. Many-body effect in an artificial atom // Physica B.– 1998. – p.246–247.
- [6] Krasny Yu.P., Kovalenko N.P., Krey U., Jasak L. Paramagnetic-diamagnetic interplay in quantum dots for non-zero temperatures // J. Phys: Condens. Matter. – 2001. – v.13. – p.4341.
- [7] Jian W.B., Fang W.Lu *at all* Spontaneous magnetization and ferromagnetism in PbSe quantum dots // J. Appl. Phys. – 2006. – v.99. – 08N708.
- [8] Szafran B., Bednarek S., Peeters F.M. Magnetic-field-induced binding of few-electron systems in shallow quantum dots // Phys. Rev.B. – 2006. – v. 74. – p. 1115310.
- [9] Маргуліс В.А., Миронов В.А. Орбітальний магнітний момент квантової ями і квантової точки в скрещених магнітном і електрическом полях // ФТТ. – 2010. – т. 52, вып. 8. – С. 1544–1548.
- [10] Maksym P.A., Chakraborty T. Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interaction // Phys. Rev. Lett. – 1990. – v. 65. – p. 108–111.
- [11] Понеділок Г., Клапчук М. Одноелектронні стани осциляторно-кулонівської моделі квантової точки // Журн. фіз. досл. – 2012. – Т. 13, №3. – С. 3702–3709.
- [12] Dias da Silva L., Lewenkopf C. H., Studart N. Orbital magnetic properties of quantum dots: the role of electron-electron interactions // arXiv: cond-mat/0309500v1, 22 Sep 2003.
- [13] Kainz J., Mikhailov S. *at all* Quantum dots in high magnetic fields: Calculation of ground-state properties // Phys. Rev. B. – 2002. – v. 65. – p. 115305.
- [14] Heiss W., Nazmitdinov R. Orbital magnetism in small quantum dots with closed shells // Piz'ma v ZhETF. – 1995. – v. 68. iss.12. – P. 870–875.
- [15] Suzuki T., Imamura H. *at all* Orbital magnetism in three-dimensional quantum dots // arXiv: cond-mat/0204524v2, 24 April 2002.
- [16] Ткач М.В., Головацький В.А., Березовський Я.М. Спектр і хвильові функції водневоподібної домішки, розміщеної в центрі квантової точки // Фізика і хімія ТТ. – 2003. – Т. 4. – С.213–220.
- [17] Bednarek S., Szafran B., Adamowski J. Many electron artificial atoms//Phys. Rev.B–1999.–v. 59.–p. 13036–13042.
- [18] Yong S.J, Mkrtchian V.E., Lee S.H. Artificial Rydberg atom//Physics Letters A. – 2009. – v. 373. – p. 976–981.
- [19] Gallagher T.F. Rydberg atoms–Cambridge University Press, 1994. – p. 495.
- [20] Абрамович М., Стиган И. Справочник по специальнym функціям: Пер. с англ. – М.: "Наука", 1979. – 832 с.
- [21] Іваненко Д.Д., Пустовалов Г.Е. Мезоатоми // УФН. – 1957. – №61. – с. 27.
- [22] Флюгге З. Задачи по квантовой механике, т.1: Пер. с англ. – М.: "Мир", 1974. –315 с.
- [23] Лукіянець Б.А., Понеділок Г.В., Рудавський Ю.К.Основи квантової фізики– Львів.: Видавництво Національного університету "Львівська політехніка", 2009.– 420 с.
- [24] Szafran B. *at all* Single-electron charging spectra: from natural to artificial atoms// Physica E. – 2003. – v. 18. – p.523–529.
- [25] Bednarek S., Szafran B., and Adamowski J. Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots//Phys. Rev. B.–2001.–v. 64, –p. 195303–195316.
- [26] Fock V. Zs. Phys.– 1928.– v.47– p.446. Darwin C. G. Proc. Camb. Phil. Soc.– 1930.–v.27– p.86.

СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Понедилок Г. В., Клапчук М. И.

*Національний університет "Львівська політехніка",
ул. С. Бандери, 12, Львов, 79013, Україна*

Предлагается осцилляторно-кулоновская модель сферической квантовой точки (СКТ) во внешнем однородном магнитном поле. Сферическая квантовая точка описывается сферически-симметричным осцилляторно-кулоновским потенциалом, который обобщает известную параболическую модель квантовой точки. Получено трансцендентное уравнение для спектра электронов и выражения для соответственных собственных функций. Исследуется зависимость спектра одноэлектронной задачи от эффективного размера квантовой точки и других параметров модельного потенциала. Получено зависимость одноэлектронных состояний СКТ в магнитном поле от циклотронной частоты ω_c/ω_0 .

Ключевые слова: сферическая квантовая точка, магнитное поле.

PACS: 73.22.-f, 73.21.La, 73.22.Dj

УДК: 517.9

STATIONARY STATES OF QUANTUM DOT IN MAGNETIC FIELD

Ponedilok G. V., Klapchuk M. I.

*National University "Lvivska Politehnika"
12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

Generalized oscillator-Coulomb model of spherical quantum dot within a uniform magnetic field is proposed. Spherical quantum dot is described by spherically symmetric oscillator-Coulomb potential which generalizes the known parabolic model of quantum dot. The transcendental equation for the electron spectrum and expressions for the wave functions are obtained. Dependence of one-electron spectrum on the quantum dot effective size and other parameters of model potential are found. Dependence of single-electron states of spherical quantum dot in magnetic field on cyclotron frequency ω_c/ω_0 is obtained.

Key words: spherical quantum dot, magnetic field.

PACS: 73.22.-f, 73.21.La, 73.22.Dj.

УДК: 517.9