

УДК 537.311

## О ВОЗМОЖНОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ТЕОРЕМЫ КОНА В СЛУЧАЕ ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Д.Б. АЙРАПЕТЯН<sup>1,2</sup>, Э.М. КАЗАРЯН<sup>1</sup>, А.А. САРКИСЯН<sup>1,3</sup><sup>1</sup>Российско-армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения<sup>2</sup>Государственный инженерный университет Армении, Ереван, Армения<sup>3</sup>Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

e-mail: shayk@ysu.am

(Поступила в редакцию 23 июля 2012 г.)

Рассмотрен электронный газ в сильно сплюснутой эллипсоидальной квантовой точке с непроницаемыми стенками. Влияние стенок квантовой точки в направлении малой полуоси (ось  $OZ$ ) предполагается настолько сильным, что кулоновским взаимодействием между электронами в этом направлении можно пренебречь и рассматривать его двумерным, парным. На основе геометрической адиабатики показано, что в случае несколько-частичного газа мощный репульсивный потенциал стенок квантовой точки имеет параболический вид и локализует ее в геометрическом центре структуры. Благодаря этому возникают условия для реализации в рассматриваемой системе обобщенной теоремы Кона.

### 1. Введение

Квантовые точки (КТ), являясь системами во многом схожими с реальными атомами, часто проявляют свойства, присущие последним. Поэтому создается уникальная возможность адаптации целого ряда квантомеханических задач атомной физики к случаям полупроводниковых КТ различных размеров и геометрических форм. Ярким примером переноса фразеологии, присущей атомной физике, на случай КТ является классификация одноэлектронных состояний в сферически-симметричных КТ по значениям орбитального квантового числа ( $s$ -состояния,  $p$ -состояния и т.д.) [1]. Данное обстоятельство существенно упрощает теоретическое описание многих физических свойств КТ, начиная от оптических и заканчивая токовыми [2]. Вместе с тем, теоретическое исследование многочастичных и несколько-частичных систем в КТ также является предметом пристального интереса специалистов, так как полученные результаты могут быть использованы при проектировании полупроводниковых приборов нового поколения.

Простейшим нульмерным комплексом, содержащим несколько частиц, является КТ с двумя электронами – “искусственный атом гелия” [3-7]. Как показывают расчеты, известные методы описания гелиеподобных атомов могут



быть удачно применены для описания свойств двухэлектронных систем в КТ. При этом, последние обладают одним важным преимуществом: в "искусственных атомах гелия" электронными состояниями можно манипулировать за счет изменения как размеров, так и геометрических форм КТ [8,9]. В случае большого количества электронов могут удачно применяться, с одной стороны, метод Хартри-Фока, а с другой — приближение Томаса-Ферми (см., в частности, работы [10-12]).

Одним из наиболее интересных многочастичных эффектов в КТ является реализация в попарно взаимодействующем электронном газе квантовых переходов, характерных для одночастичных систем (теорема Кона) [13,14]. Теорема Кона изначально была сформулирована для случая электронного газа в магнитном поле [15]. Из-за наличия поля электронный газ оказывался локализованным в параболической яме. В дальнейшем, после реализации КТ с параболическим ограничивающим потенциалом, удалось локализовать электронный газ без помощи магнитного поля, благодаря осцилляторному потенциалу стенок КТ (обобщенная теорема Кона). Параболический вид ограничивающего потенциала позволяет в случае электронного газа с парным взаимодействием отделять движение центра масс от относительного и тем самым реализовывать условия для выполнения теоремы Кона. Формирование параболического профиля потенциала ограничения КТ может быть обусловлено, например, взаимной диффузией компонент КТ и окружающей ее среды [16-18]. Вместе с тем, в ряде работ было показано [19,20], что в КТ с сильно сплюснутой и сильно вытянутой эллипсоидальной симметриями также могут быть реализованы условия для возникновения параболического потенциала ограничения стенок КТ. Поэтому вполне логично ожидать, что в таких системах может выполняться обобщенная теорема Кона.

В предлагаемой работе рассмотрено поведение электронного газа в сильно сплюснутой эллипсоидальной КТ (ССЭКТ). Обсуждаются условия, при которых в данной системе могут иметь место квантовые переходы, определяемые теоремой Кона.

## 2. Теория

Рассмотрим эллипсоидальную КТ, которая имеет форму сильно сплюснутого эллипсоида вращения с непроницаемыми стенками. Потенциал ограничения для каждой из частиц запишется в следующем виде:

$$\hat{V}_{\text{conf}}(x, y, Z) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} \leq 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} > 1 \end{cases}, \quad a \gg c, \quad (1)$$

где  $c$  и  $a$  — соответственно, малая и большая полуоси ССЭКТ. Геометрическая специфика КТ такова, что движение частиц вдоль оси  $OZ$  происходит значи-



тельно быстрее, чем в плоскости, перпендикулярной к ней. В рассматриваемой системе находятся  $N$  частиц, которые попарно взаимодействуют друг с другом. Нами предполагается, что взаимодействие частиц со стенками КТ вдоль оси  $OZ$  настолько сильно, что можно пренебречь межчастичным взаимодействием в этом направлении. Поэтому оператор взаимодействия между электронами  $\hat{V}_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  будет функцией только координат в плоскости  $XOY$   $\rho(x, y)$  и, при этом, зависящей от взаимного расположения частиц  $|\rho_i - \rho_j| = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$  в плоскости КТ. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N (\hat{P}_{xj}^2 + \hat{P}_{yj}^2) + \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N \hat{P}_{zj}^2 + \sum_{j=1}^N \hat{V}_{\text{conf}}(x_j, y_j, z_j) + \hat{V}_{\text{int}}(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N). \quad (2)$$

Как следует из (2), в  $Z$ -направлении каждый электрон совершает движение в одномерной бесконечно глубокой яме. Согласно адиабатическому приближению, волновую функцию системы ищем в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \chi_{n_{z1}, n_{z2}, \dots, n_{zN}}(z_1(\rho_1), z_2(\rho_2), \dots, z_N(\rho_N)) f(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N). \quad (3)$$

При фиксированном значении координаты  $\rho$  движение каждой из частиц будет локализовано в одномерной потенциальной яме с эффективной шириной

$$d_{zj}(\rho_j) = 2c\sqrt{1 - \rho_j^2/a^2}. \quad (4)$$

При сравнительно небольшом количестве частиц можно предположить, что состояния электронов в  $Z$ -направлении не зависят друг от друга и поэтому соответствующая волновая функция будет произведением одночастичных волновых функций:

$$\chi_{n_{z1}, n_{z2}, \dots, n_{zN}}(z_1(\rho_1), z_2(\rho_2), \dots, z_N(\rho_N)) = \prod_{j=1}^N \sqrt{\frac{2}{d_{zj}}} \begin{cases} \sin \frac{\pi n_{zj} z_j}{d_{zj}(\rho_j)} & (n_{zj} - \text{нечетное}) \\ \cos \frac{\pi n_{zj} z_j}{d_{zj}(\rho_j)} & (n_{zj} - \text{четное}) \end{cases}. \quad (5)$$

В свою очередь, для спектра, описывающего состояния системы в  $Z$ -направлении,  $E_{n_{z1}, n_{z2}, \dots, n_{zN}}^{(z)}$ , имеем:

$$E_{n_{z1}, n_{z2}, \dots, n_{zN}}^{(z)}(\rho_1, \dots, \rho_N) = \sum_{j=1}^N \frac{\pi^2 \hbar^2 n_{zj}^2}{2\mu d_{zj}^2(\rho_j)}. \quad (6)$$

Уточним подробнее критерии применимости указанных нами приближений. Между электронами действуют кулоновские силы отталкивания. С другой стороны, на каждый электрон действует также сила со стороны стенок КТ.

При этом энергия размерного квантования определяется областью локализации каждого из электронов в направлении оси  $OZ$ . В силу выбранной геометрии КТ следует, что энергия локализации электронов в  $Z$ -направлении определяется как

$$E_{n_z}^{(z)}(\rho_j) \sim \hbar^2 / \mu d_{zj}^2(\rho_j). \quad (7)$$

Следовательно, критерием применимости двумерного характера межэлектронного взаимодействия будет

$$\hbar^2 / \mu d_{zj(i)}^2(\rho_{j(i)}) \gg e^2 / \sqrt{(\rho_i - \rho_j)^2 + (z_i - z_j)^2}, \quad (8)$$

для любых значений  $i$  и  $j$ . В случае парного взаимодействия оператор взаимодействия  $\hat{V}_{\text{int}}$  будет иметь вид

$$\hat{V}_{\text{int}}(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U(|\rho_i - \rho_j|). \quad (9)$$

Уравнение Шредингера для рассматриваемой системы имеет следующую форму:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E_{n_1, n_2, \dots, n_N} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (10)$$

Подставляя выражение (3) в (2), а также учитывая формулы (5) и (6), в грубом адиабатическом приближении получим [21]

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N (\hat{p}_{xj}^2 + \hat{p}_{yj}^2) + \sum_{j=1}^N \frac{\pi^2 \hbar^2 n_{zj}^2}{2\mu d_{zj}^2(\rho_j)} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U(|\rho_i - \rho_j|) \right\} f(\rho_1, \dots, \rho_N) = E_{1, \dots, N} f(\rho_1, \dots, \rho_N). \quad (11)$$

Согласно формуле (4), ширины одномерных ям  $d_{zj}(\rho_j)$  параметрическим образом зависят от переменных  $\rho_j$ . Если число электронов  $N$  небольшое, а размерное квантование в  $Z$ -направлении достаточно сильное, то подавляющее большинство из них будет локализовано в геометрическом центре ССЭКТ. Условие локализации электронов в центре КТ математически выразится соотношением  $\rho_j \ll a$ . С учетом указанного неравенства, разлагая в ряд суммы

$$S_N = \sum_{j=1}^N \left( \pi^2 \hbar^2 n_{zj}^2 / 2\mu d_{zj}^2(\rho_j) \right), \quad (12)$$

после некоторых преобразований придем к следующему уравнению Шредингера:

$$\left\{ \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N (\hat{p}_{xj}^2 + \hat{p}_{yj}^2) + \sum_{j=1}^N \frac{\mu \Omega_j^2 \rho_j^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U(|\rho_i - \rho_j|) \right\} f(\rho_1, \dots, \rho_N) = (E_{1, \dots, N} - S_N^{(0)}) f(\rho_1, \dots, \rho_N), \quad (13)$$



где введены новые обозначения

$$S_N^{(0)} = \sum_{j=1}^N \frac{\pi^2 \hbar^2 n_{zj}^2}{8\mu c^2}, \quad (14)$$

$$\Omega_j^2 = \frac{\pi^2 \hbar^2 n_{zj}^2}{2\mu^2 a^2 c^2}. \quad (15)$$

Отметим важную деталь, связанную со спецификой рассматриваемой системы. Частота параболического потенциала ограничения  $\Omega_j$  определяется геометрическими параметрами КТ (большая и малая полуоси), а также квантовым числом  $Z$ -направления  $n_{zj}$ . Таким образом, варьируя размерами КТ, можно управлять крутизной параболического потенциала ограничения КТ, тем самым создавая наиболее благоприятные условия для локализации электронного газа в середине КТ.

Так как в  $Z$ -направлении размерное квантование очень сильное и межузловые расстояния  $\Delta E_{n_{zj}, n_{zj+1}}^{(z)}$  принимают большие значения, то естественно предположить, что электроны будут иметь квантовые числа  $n_{z1} = n_{z2} = \dots = n_{zN} = 1$ . Следовательно, для  $\Omega_j$  можно записать:

$$\Omega_1 = \Omega_2 = \dots = \Omega_N \equiv \Omega = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\pi \hbar}{\mu a c}. \quad (16)$$

Таким образом, приходим к следующему гамильтониану:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N (\hat{p}_{xj}^2 + \hat{p}_{yj}^2) + \frac{\mu\Omega^2}{2} \sum_{j=1}^N (x_j^2 + y_j^2) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (17)$$

Если теперь ввести известные операторы рождения и уничтожения  $\hat{C}_{x(y)}^\pm = (\mu\Omega/2\hbar)^{1/2} \sum_{j=1}^N (x_j(y_j) \mp i\hat{p}_{y(x)j}/\mu\Omega)$  [14], то прямым вычислением можно убедиться, что имеют место следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{V}_{\text{int}}, \hat{C}_x^\pm] = [\hat{V}_{\text{int}}, \hat{C}_y^\pm] = 0, \quad (18)$$

$$[\hat{H}_0, \hat{C}_x^\pm] = \pm \hbar\Omega \hat{C}_x^\pm, \quad [\hat{H}_0, \hat{C}_y^\pm] = \pm \hbar\Omega \hat{C}_y^\pm, \quad (19)$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^N (\hat{p}_{xj}^2 + \hat{p}_{yj}^2) + \frac{\mu\Omega^2}{2} \sum_{j=1}^N (x_j^2 + y_j^2). \quad (20)$$

С учетом соотношений (18) для гамильтониана взаимодействующих частиц (17) получим аналогичные (19) коммутационные соотношения:

$$[\hat{H}, \hat{C}_x^\pm] = \pm \hbar\Omega \hat{C}_x^\pm, \quad [\hat{H}, \hat{C}_y^\pm] = \pm \hbar\Omega \hat{C}_y^\pm. \quad (21)$$

Если функция  $f_{n_x, n_y}$  является собственной функцией оператора  $\hat{H}$ , которому соответствует собственное значение  $E_{n_x, n_y}$ , то из (21) следует, что функция  $\hat{C}_x^+ f_{n_x, n_y}$  также будет собственной функцией оператора  $\hat{H}$ , но теперь с энергией

$$\hat{C}_x^+ f_{n_x, n_y} \rightarrow E_{n_x, n_y} + \hbar\Omega. \quad (22)$$

В свою очередь, для  $\hat{C}_x^- f_{n_x, n_y}$  получим

$$\hat{C}_x^- f_{n_x, n_y} \rightarrow E_{n_x, n_y} - \hbar\Omega, \quad (23)$$

и то же самое можно записать для у-компоненты [22].

Пусть теперь на систему падает длинноволновое электромагнитное возмущение, электрическая составляющая которого имеет вид

$$\mathbf{E}(t) = e^{-i\omega t} \mathbf{E}_0(\cos\theta, \sin\theta). \quad (24)$$

В указанном приближении оператор возмущения запишется в форме

$$\hat{H}_1 = -e \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j \mathbf{E}(t). \quad (25)$$

Прямым вычислением можно убедиться, что

$$\sum_{j=1}^N x_j(y_j) = (\hbar/\mu\Omega)^{1/2} (\hat{C}_{x(y)}^+ + \hat{C}_{x(y)}^-). \quad (26)$$

Рассмотрим воздействие оператора  $\hat{H}_1$  на собственные волновые функции  $f_{n_x, n_y}^{(0)}$  гамильтониана  $\hat{H}_0$ . Из теории квантовых переходов следует, что действие  $\hat{H}_1$  на  $f_{n_x, n_y}^{(0)}$  свяжет собственное состояние  $E_{n_x, n_y}^{(0)}$  гамильтониана  $\hat{H}_0$  с состояниями  $E_{n_x, n_y}^{(0)} \pm \hbar\Omega$ , которые будут соответствовать собственным функциям  $\hat{C}_x^\pm f_{n_x, n_y}^{(0)}$ , а также  $\hat{C}_y^\pm f_{n_x, n_y}^{(0)}$ . С другой стороны, согласно (26), действие оператора  $\hat{H}_1$  на функцию  $f_{n_x, n_y}$  свяжет состояние  $E_{n_x, n_y}$  теперь уже гамильтониана (19) с состояниями  $E_{n_x, n_y} \pm \hbar\Omega$ . Таким образом, и в случае электронного газа с учетом межчастичного взаимодействия, и в случае, когда это взаимодействие отсутствует, под воздействием длинноволнового излучения в обоих случаях имеют место дипольные переходы, определяемые частотами  $\pm\Omega$ , что и является сутью теоремы Кона.

### 3. Заключение

Таким образом, в данной работе нами показана возможность обнаружения одночастичных переходов в многочастичной системе для случая электронного газа, находящегося в ССЭКТ. При этом формирование параболического потенциала ограничения электронного газа обусловлено специфической геометрией КТ.

Работа выполнена в рамках государственной базовой программы Республики Армения "Исследования физических свойств квантовых наноструктур со сложной геометрией и разными ограничивающими потенциалами".



1. Э.М.Казарян, С.Г.Петросян. Физические основы полупроводниковой наноэлектроники. Ереван, изд. РАУ, 2005.
2. D.Bimberg, M.Grundman, N.Ledentsov. Quantum Dot Heterostructures. New York, Wiley, 1999.
3. D.Pfannkuche, R.Gerhardt. Phys. Rev. B, 44, 13132 (1991).
4. D.Pfannkuche, R.Gerhardt, P.Maksym, V.Gudmundsson. Physica B, 189, 6 (1993).
5. M.Encinosa, B.Etemadi. Physica B, 266, 361 (1999).
6. T.Sako, G.H.F.Diercksen. J. Phys. B, 36, 1681 (2003).
7. O.Ciftja, M.G.Faruk. Phys. Rev. B, 72, 205334 (2005).
8. N.G.Aghekyan, E.M.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan. Proc. SPIE, 7998, 79981C (2010).
9. N.G.Aghekyan, E.M.Kazaryan, A.A.Kostanyan, H.A.Sarkisyan. Superlattice Microst., 50, 199 (2011).
10. R.Pino. Phys. Rev. B, 58, 4644 (1998).
11. R.Pino. Eur. Phys. J. B, 13, 723 (2000).
12. L.Martín-Moreno. Sol. St. Electr., 37, 1179 (1994).
13. P.A.Maksym, T.Chakraborty. Phys. Rev. Lett., 65, 108 (1990).
14. F.M.Peeters. Phys. Rev. B, 42, 1486 (1990).
15. W.Kohn. Phys. Rev., 123, 1242 (1961).
16. J.A.Barker, E.P.O'Reilly. Physica E, 4, 231 (1999).
17. Л.С.Петросян. Изв. НАН Армении, Физика, 37, 173 (2002).
18. В.М.Мугнечян, А.А.Киракосян. Изв. НАН Армении, Физика, 42, 83 (2007).
19. Д.Б.Айрапетян. Изв. НАН Армении, Физика, 42, 442 (2007).
20. K.G.Dvoyan, D.B.Hayrapetyan, E.M.Kazaryan, A.A.Tshantshapanyan. Nanoscale Res. Lett., 2, 601 (2007).
21. А.Мигдал, В.Крайнов. Приближенные методы квантовой механики. М., Наука, 1966.
22. H.A.Sarkisyan. Phys. Part. Nucl. Lett., 4, 51 (2007).

# ON THE POSSIBILITY OF IMPLEMENTATION OF KOHN'S THEOREM IN THE CASE OF ELLIPSOIDAL QUANTUM DOTS

D.B. HAYRAPETYAN, E.M. KAZARYAN, H.A. SARKISYAN

An electron gas in a strongly oblated ellipsoidal quantum dot with impenetrable walls is considered. Influence of the walls of the quantum dot is assumed to be so strong in the direction of the minor axis (the axis OZ) that the Coulomb interaction between electrons in this direction can be neglected and may be considered as two-dimensional, coupled. On the basis of geometric adiabaticity it is shown that in the case of a few-particle gas a powerful repulsive potential of the quantum dot walls has a parabolic form and localizes the dot in the geometric center of the structure. Due to this fact, conditions occur to implement the generalized Kohn theorem in this system.