

Кулоновские состояния вnanoструктурах, случайное вырождение и оператор Лапласа–Рунге–Ленца

M. A. Семина¹⁾, P. A. Сурик

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 19 августа 2011 г.

Исследована структура энергетических уровней пространственно непрямых кулоновских комплексов. Рассмотрены два предельных случая, соответствующие двумерному атому водорода и плоскому изотропному гармоническому осциллятору, в которых присутствует “случайное” вырождение. При помощи численного расчета продемонстрирована эволюция структуры энергетических уровней при переходе между указанными предельными случаями.

1. Введение. Одним из интересных свойств полупроводниковых наноразмерных структур является то, что с их помощью можно моделировать широкий круг квантовомеханических систем. Действительно, технологическая возможность встроить в полупроводник потенциал почти любого профиля позволяет получить искусственный объект с желаемыми свойствами. Исследования оптических свойств нанообъектов позволяют определить энергетический спектр носителей заряда и, таким образом, экспериментально проверить решение соответствующей квантовомеханической задачи. Задача о движении частицы в сферически-симметричном потенциальном поле $V(\mathbf{r}) \propto -1/r$, где r – расстояние до центра, широко известна (такой вид имеют кулоновское и гравитационное поля). В полупроводниковых структурах к такой задаче сводится, например, задача о нахождении уровней энергии донорной примеси или экситона Ванье–Мотта. Отличительным свойством кулоновского потенциала является “случайное” вырождение энергетических уровней, т.е. дополнительное многократное вырождение, не связанное с пространственной симметрией задачи. В данном случае это вырождение обусловлено наличием коммутирующего с гамильтонианом оператора Лапласа–Рунге–Ленца [1, 2]:

$$\hat{\mathbf{A}} = (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{2me^2}{r}\mathbf{r}, \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{L}}$ – операторы импульса и момента импульса, e , m и \mathbf{r} – заряд, масса и радиус-вектор частицы соответственно.

Еще одним особенным потенциалом является потенциал изотропного гармонического осциллятора $V(\mathbf{r}) \propto r^2$. В этом случае также имеется коммутирующий с гамильтонианом нетривиальный тензор-

ный оператор. Его линейно-независимые компоненты можно записать следующим образом [3]:

$$\hat{A}_{xx} - \hat{A}_{yy}, \quad \hat{A}_{yy} - \hat{A}_{zz}, \quad \hat{A}_{xy} + \hat{A}_{yx}, \quad (2)$$

$$\hat{A}_{xz} + \hat{A}_{zx}, \quad \hat{A}_{yz} + \hat{A}_{zy},$$

где

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_i \hat{p}_j + m^2 \omega^2 x_i x_j), \quad i, j = x, y, z. \quad (3)$$

Здесь \hat{p}_i – декартовы компоненты оператора импульса, ω – собственная частота осциллятора. Таким образом, в гармоническом потенциале, так же как и в кулоновском, присутствует случайное вырождение энергетических уровней, однако кратность вырождения другая. Из классической механики известно, что кулоновский и гармонический потенциалы являются единственными сферически-симметричными потенциалами, в которых отсутствует прецессия траектории, и все траектории, соответствующие связанным состояниям, являются замкнутыми.

Представляется интересным исследовать реальную систему, в которой потенциал в зависимости от параметров мог бы эволюционировать от кулоновского к потенциалу изотропного гармонического осциллятора. В такой системе можно было бы проследить изменение структуры энергетических уровней от одного предельного случая многократного вырождения к другому через область сильного расщепления вырожденных в обоих пределах уровней.

В объемном материале простую систему с необходимыми свойствами не реализовать. Обратимся к низкоразмерным структурам: рассмотрим электрон в узкой квантовой яме, локализованный на доноре, который расположен в барьере [4, 5]. Такая система естественным образом проявляется в δ -легированных структурах, когда легирующая примесь помещается

¹⁾ e-mail: msemina@gmail.com

в барьере. Потенциал взаимодействия электрона с заряженным центром имеет вид $V(\rho) \propto (\rho^2 + D^2)^{-1/2}$, где ρ – координата электрона в плоскости квантовой ямы, D – расстояние от донора до квантовой ямы. Такой потенциал при изменении единственного параметра D переходит от двумерного кулоновского потенциала (донор в центре квантовой ямы) к потенциалу плоского изотропного гармонического осциллятора (донор глубоко в барьере). Другой подходящей системой является структура с двумя квантовыми ямами, в которой возбуждается пространственно-непрямой экситон: пара электрон – в одной яме, дырка – в другой. Здесь параметром, контролирующим переход между предельными случаями, является расстояние между квантовыми ямами. Пространственно-непрямые экситоны проявляют ряд интересных свойств, таких, как их бозе-конденсация [6–8]. Отметим, что исследуются и более сложные трехчастичные комплексы: пространственно-непрямые трионы [9, 10].

Для определенности будем изучать более простую из описанных выше систем – электрон, локализованный на доноре. Рассмотрим узкую квантовую яму, в которой движение электрона можно считать двумерным, т.е. расстояние между уровнями его размерного квантования много больше других характерных энергий в системе, и ионизованный донор в барьере, находящийся на расстоянии D от квантовой ямы. Пусть концентрация электронов и заряженных центров достаточно мала для того, чтобы каждый комплекс можно было рассматривать независимо от других. В случае пространственно-непрямого экситона необходимым условием также является малая концентрация носителей заряда, для того чтобы каждую связанную электрон-дырочную пару (экситон) можно было рассматривать независимо.

В модели простых зон гамильтониан электрона, локализованного на доноре, имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_e - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + D^2}}, \quad (4)$$

где Δ_e – двумерный оператор Лапласа, действующий на координаты электрона, ρ – радиус-вектор электрона в плоскости структуры, e – элементарный заряд, ϵ – диэлектрическая постоянная.

Выберем в качестве единиц измерения энергии и длины объемные Ридберг, $Ry = m_e e^4 / 2\epsilon^2 \hbar^2$, и боровский радиус, $a_B = \hbar^2 \epsilon / m_e e^2$ соответственно. Тогда гамильтониан (4) преобразуется к виду

$$\hat{H} = -\Delta - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}}, \quad (5)$$

где Δ – безразмерный двумерный оператор Лапласа, d – безразмерное расстояние между донором и квантовой ямой.

Чтобы получить гамильтониан для непрямого экситона, нужно заменить радиус-вектор электрона ρ на координату относительного движения электрона и дырки, $\rho = \rho_e - \rho_h$, а массу электрона m_e – на приведенную массу, $\mu = (m_e m_h) / (m_e + m_h)$. Электрон, локализованный на доноре, и пространственно-непрямой экситон схематически изображены на рис. 1.

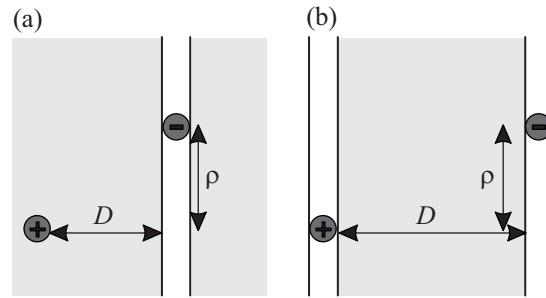


Рис. 1. Схематическое изображение двух реализаций исследуемой системы: (a) – Заряженный донор в барьере. (b) – Пространственно-непрямой экситон

В предельном случае $d \rightarrow 0$ асимптотика потенциала взаимодействия следующая:

$$-\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} \approx -\frac{2}{\rho}, \quad (6)$$

а гамильтониан (5) соответствует гамильтониану двумерного атома водорода. В противоположном пределе, $d \rightarrow \infty$, асимптотика потенциала взаимодействия

$$-\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} \approx -\frac{2}{d} + \frac{\rho^2}{d^3}, \quad (7)$$

а гамильтониан (5) соответствует гамильтониану двумерного изотропного гармонического осциллятора. Следовательно, в рамках одной и той же структуры можно смоделировать и двумерный атом водорода, и плоский гармонический осциллятор.

Рассмотрим подробнее каждый из этих пределов.

2. Предел двумерного атома водорода, $d \rightarrow 0$. Задача о двумерном атоме водорода хорошо известна [11]. Энергетические уровни имеют следующую структуру:

$$E_n = -\frac{1}{(n + 1/2)^2}, \quad (8)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$ – главное квантовое число. Они $(2n + 1)$ -кратно вырождены по магнитному кванто-

вому числу m , которое при заданном значении n может принимать значения от $-n$ до n . Вырождение, как и в случае объемного атома водорода, является случайнм. Для двумерного атома водорода существует безразмерный оператор, аналогичный оператору Лапласа–Рунге–Ленца, коммутирующий с гамильтонианом (5) при $d = 0$ [11]:

$$\hat{\mathbf{A}} = (\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}_z - \hat{\mathbf{L}}_z \times \hat{\mathbf{p}}) - \frac{2}{\rho} \rho, \quad (9)$$

где $\hat{\mathbf{L}}_z$ – безразмерный оператор z -компоненты момента импульса.

При $d \neq 0$ случайное вырождение снимается, остается только вырождение, связанное с цилиндрической симметрией задачи: уровни энергии, соответствующие состояниям с магнитными квантовыми числами m и $-m$ при заданном квантовом числе n , совпадают.

3. Предел двумерного изотопного гармонического осциллятора. В пределе больших расстояний от донора до квантовой ямы, $d \rightarrow \infty$, гамильтониан исследуемой системы имеет вид

$$\hat{H} = -\Delta - \frac{2}{d} + \frac{\rho^2}{d^3}. \quad (10)$$

Это соответствует гамильтониану двумерного изотропного гармонического осциллятора с жесткостью потенциала $\kappa = 2/d^{3/2}$. Отсюда получаем выражение для собственных энергетических уровней:

$$E_p = -\frac{2}{d} + \frac{2}{d^{3/2}}(p+1), \quad (11)$$

где $p = 0, 1, 2, \dots$ – главное квантовое число. Энергетические уровни (11) также многократно вырождены. Для уровня с номером p кратность вырождения составляет $p+1$. В данном предельном случае вырождение связано с наличием коммутирующего с гамильтонианом (10) оператора, аналогичного (9). Компоненты этого оператора [12]

$$S_x = p_x p_y + \frac{xy}{d^3}, \quad S_y = \frac{p_y^2 - p_x^2}{2} + \frac{y^2 - x^2}{2d^3}, \quad (12)$$

где x и y – декартовы координаты электрона относительно донора или относительные декартовы координаты электрона и дырки, p_x и p_y – соответствующие компоненты импульса. Они связаны с безразмерным тензорным оператором (3) как

$$S_x = \frac{1}{2}(A_{xy} + A_{yx}), \quad S_y = \frac{1}{2}(A_{yy} - A_{xx}). \quad (13)$$

4. Теория возмущений. В области реализации каждого предельного случая рассматриваемая зада-

ча решается аналитически и существуют две системы ортонормированных волновых функций. Собственные функции двумерного атома водорода ($d = 0$) имеют вид [13]

$$\begin{aligned} \psi_{nm}(\rho, \phi) = & C_{n,m} \exp\left(-\frac{2\rho}{2n+1} - im\phi\right) \times \\ & \times \left(\frac{4\rho}{2n+1}\right)^{|m|} L_{n_1-|m|}^{2|m|}\left(\frac{4\rho}{2n+1}\right), \\ m = & -n, -n+1, \dots, n-1, n. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь ϕ – полярный угол, $L_a^b(\rho)$ – обобщенные полиномы Лагерра, $C_{n,m}$ – нормировочная константа.

Вторым естественным базисным набором являются собственные функции плоского изотропного гармонического осциллятора ($d \rightarrow \infty$):

$$\begin{aligned} \psi_{pm}(\rho, \phi) = & B_{p,m} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2d^{3/2}} - im\phi\right) \times \\ & \times \left(\frac{\rho}{d^{3/2}}\right)^{|m|} L_{p/2-|m|/2}^{|m|}\left(\frac{\rho^2}{d^{3/2}}\right), \\ m = & -p, -p+2, \dots, p-2, p, \end{aligned} \quad (15)$$

где $B_{p,m}$ – нормировочная константа.

В области реализации каждого из предельных случаев отклонение энергии каждого энергетического уровня от ее предельного значения можно оценить по теории возмущений. При этом в качестве возмущения нужно рассматривать разницу между потенциалом взаимодействия и соответствующей асимптотикой, (6) или (7).

При малых значениях d отклонение потенциала взаимодействия от кулоновского можно записать в виде

$$V_1(\rho, d) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + \frac{2}{\rho}, \quad (16)$$

Матричные элементы (16) на функциях (14), $V_{1n_1, n_2}^{m_1 m_2}(d)$, вычисляются аналитически. Однако они имеют громоздкий вид. Поэтому в данной работе они не приводятся.

Изучим их асимптотику при $d \rightarrow 0$. Так как потенциал (16) не смешивает состояния с различными магнитными квантовыми числами m_1 и m_2 , будем рассматривать случай $m_1 = m_2 = m$. Например, диагональные матричные элементы имеют вид

$$V_{1n,n}^{00}(\rho, d) \approx \frac{8}{(2n+1)^2} \frac{4d}{2n+1}, \quad (17)$$

$$V_{1n,n}^{11}(\rho, d) \approx \frac{2}{3(2n+1)} \left(\frac{4d}{2n+1}\right)^2, \quad n \geq 1, \quad (18)$$

$$V_{1n,n}^{22}(\rho, d) \approx \frac{1}{15(2n+1)} \left(\frac{4d}{2n+1} \right)^2, n \geq 2, \quad (19)$$

и т.д. Таким образом, при $m = 0$ матричные элементы линейны по d , а при $|m| \geq 1$ имеют квадратичную зависимость. Внедиагональные матричные элементы, вычисленные на волновых функциях, соответствующих состояниям с различными главными квантовыми числами, $n_1 \neq n_2$, имеют тот же характер зависимости от d , что и диагональные, но с другим (меньшим) коэффициентом пропорциональности. Тем не менее внедиагональные матричные элементы имеют тот же порядок величины, что и диагональные. Таким образом, происходит не только расщепление уровней энергии по модулю магнитного квантового числа, но и перемешивание состояний с различными значениями главного квантового числа n .

Предельный случай двумерного атома водорода реализуется, если величины $V_{1n_1,n_2}^{m_1 m_2}(d)$ малы по сравнению с расстоянием между уровнями энергии атома водорода с номерами n и $n + 1$, что имеет место при

$$d \ll \frac{(2n+1)(n+1)}{(2n+3)^2}. \quad (20)$$

В противоположном предельном случае, $d \rightarrow \infty$, естественным выбором базиса является (15). Здесь в качестве возмущения выступает потенциал

$$V_2(d) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + d^2}} + \frac{2}{d} - \frac{\rho^2}{d^3}. \quad (21)$$

Так же как и в предыдущем предельном случае, матричные элементы потенциала (21) на базисе (14), $V_{2p_1,p_2}^{m_1 m_2}(d)$, вычисляются аналитически (ввиду громоздкости здесь они тоже не приводятся). Величины $V_{2p_1,p_2}^{m_1 m_2}(d)$ отличны от нуля только при $m_1 = m_2 = m$.

Рассмотрим асимптотики диагональных матричных элементов $V_{2p,p}^{mm}(d)$ при $d \rightarrow \infty$:

$$V_{2p,p}^{mm}(\rho) \approx \frac{C(p, |m|)}{d^2}, \quad (22)$$

где, например,

$$C(p, p) = -\frac{3(p+1)(p+2)}{4}, C(p, p-2) = -\frac{3p(p+5)}{4}, \dots \quad (23)$$

При больших p имеем $C(p, m) \propto p^2$. Внедиагональные матричные элементы $V_{2p_1,p_2}^{mm}(\rho) \propto d^{-2}$ при $|p_1 - p_2| \leq 4$ и $\propto d^{-5/2}$ при $|p_1 - p_2| \geq 4$. При этом при $|p_1 - p_2| \leq 4$ и не слишком больших значениях p_1, p_2 внедиагональные матричные элементы оказываются сравнимыми с диагональными. Это говорит

о значительном перемешивании волновых функций соответствующих состояний.

Этот предельный случай реализуется, если матричные элементы (21) малы по сравнению с расстоянием между энергетическими уровнями гармонического осциллятора. Это условие записывается как

$$\sqrt{d} \gg C(p, |m|) \propto p^2, \quad p \rightarrow \infty. \quad (24)$$

Таким образом, чем больше номер уровня, тем большее значение параметра d , при котором происходит переход к предельному случаю гармонического осциллятора.

Расчет показал, что диагональные матричные элементы операторов (16) и (21), вычисленные на базисах (14) и (15) соответственно, оказываются того же порядка величины, что и не равные нулю внедиагональные. Поэтому для исследования энергетической структуры донора построения ряда теории возмущений только на волновых функциях, соответствующих одному энергетическому уровню, недостаточно.

5. Численный расчет. Проиллюстрируем с помощью численного расчета перестройку энергетических уровней донорной примеси и непрямого экситона от одной системы случайно вырожденных уровней к другой через промежуточную область, в которой существенно не только расщепление энергетических уровней, но и перемешивание состояний с различными главными квантовыми числами.

При не слишком больших значениях параметра d ($d < 20$) наилучшую сходимость дает разложение гамильтонiana (5) по базису собственных функций двумерного атома водорода (14). Для расчета энергий связи электрона на доноре при больших значениях d ($d > 100$) лучше подходит базис собственных функций двумерного осциллятора (15). В промежуточной области ($20 < d < 100$) использовались как базис (14), так и базис (15). В этой области использование обоих базисов позволяет получить совпадающие результаты. Количество элементов в базисе выбиралось достаточным для сходимости расчета.

На рис. 2 представлена зависимость от d энергий связи состояний, соответствующих при $d = 0$ первым уровням энергии. При $d \neq 0$ они расщепляются на 4 невырожденных состояния ($m = 0$) и на 6 двукратно вырожденных ($|m| = 1, 2$). При увеличении d начинается перестройка структуры уровней. В этой области становится существенным не только расщепление, но и перемешивание состояний, соответствующих различным энергетическим уровням.

Так как кратности вырождения в предельных случаях различны, в переходной области происходит перегруппировка энергетических уровней. На-

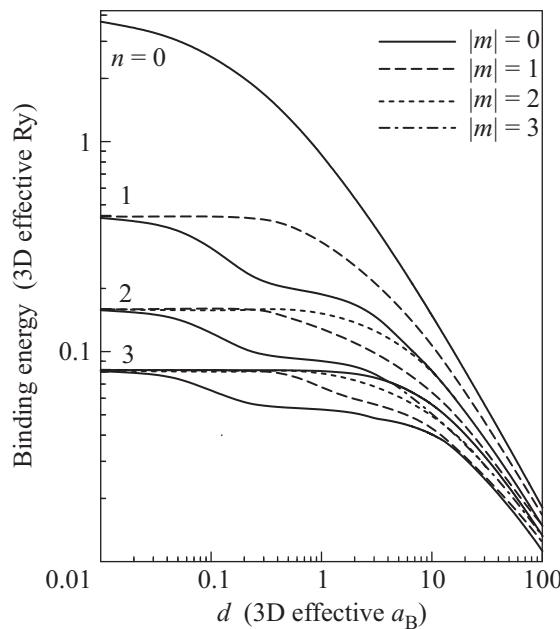


Рис. 2. Зависимость энергии связи экситона от расстояния между слоями d . Показаны зависимости, соответствующие первым 4 уровням в предельном случае $d \rightarrow 0$

пример, трехкратно вырожденный уровень осциллятора с квантовым числом $p = 2$ получается, когда сходятся невырожденный уровень, которому при $d = 0$ соответствует состояние с квантовыми числами $n = 1, m = 0$, и двукратно вырожденный уровень, которому в пределе атома водорода соответствуют состояния с квантовыми числами $n = 2, m = \pm 2$. При дальнейшем увеличении d наблюдаются переход к энергетической структуре двумерного осциллятора и уменьшение расщепления энергетических уровней.

Для наглядной иллюстрации перехода к пределу гармонического осциллятора рассмотрим величину

$$\delta E = \frac{1}{2} \left(E_d + \frac{2}{d} \right) d^{3/2}, \quad (25)$$

где E_{ex} – полная энергия донора. С ростом d величина $\delta E \rightarrow p+1$. Отличие δE от $p+1$ показывает, насколько хорошо реализуется предельный случай гармонического осциллятора. Зависимость $\delta E(d)$ представлена на рис. 3. Видно, что при больших d действительно происходит переход к энергетической структуре гармонического осциллятора (11), уровни которого показаны на рис. 3 штриховыми линиями.

6. Заключение. Таким образом, на примере электрона в квантовой яме, локализованного на доноре, находящемся в барьере, а также пространственно-непрямого экситона была исследована эволюция структуры энергетических уровней между двумя пределами, характеризующимися случайнym вы-

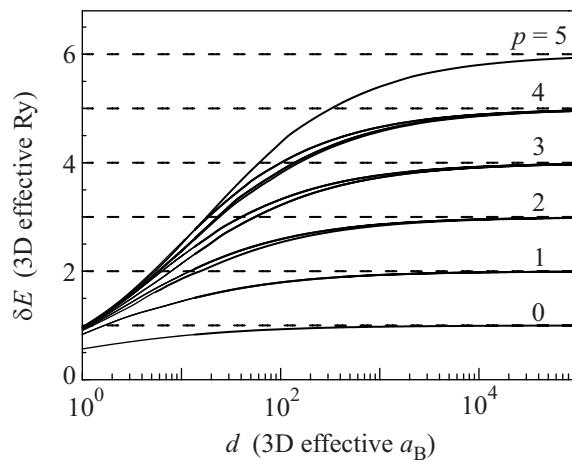


Рис. 3. Зависимость величины δE от d . Сплошные кривые соответствуют результатам численного расчета, штриховые – предельному значению $p+1$

рождением. Показано, что в промежуточной области существенно не только расщепление энергетических уровней, но и перемешивание между состояниями с различными значениями главных квантовых чисел в обоих предельных случаях. Продемонстрировано, что область реализации каждого из предельных случаев зависит от номера энергетического уровня, т.е. от характерного размера соответствующей волновой функции.

Авторы благодарны за финансовую поддержку РФФИ (грант # 11-02-00573-а), и программе Президиума РАН “Основы фундаментальных исследований нанотехнологий и наноматериалов”.

1. V. A. Fock, Z. Phys. **98**, 145 (1935).
2. W. Pauli, Z. Phys. **36**, 336 (1926).
3. J. M. Jauch and E. L. Hill, Phys. Rev. **57**, 641 (1940).
4. R. L. Greene and P. Lane, Phys. Rev. B **34**, 8639 (1986).
5. A. Blom, M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, and K. A. Chao, Phys. Rev. B **65**, 155302 (2002).
6. А. А. Дремин, А. В. Ларинов, В. Б. Тимофеев, ФТТ **46**, 168 (2004).
7. I. V. Kukushkin, A. V. Rossokhaty, S. Schmult, and K. von Klitzing, Semicond. Sci. Technol. **26**, 014023 (2011).
8. L. V. Butov, A. Zrenner, G. Abstreiter et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 304 (1994).
9. Д. В. Кулаковский, Ю. Е. Лозовик, Письма в ЖЭТФ **76**, 598 (2002).
10. Р. А. Сергеев, Р. А. Сурис, ФТП **37**(10), 1235 (2003).
11. D. G. W. Parfitt and M. E. Portnoi, J. Math. Phys. **43**, 4681 (2002).
12. R. D. Mota, V. D. Granados, A. Queijeiro, and J. Garcia, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 2979 (2002).
13. C. Y.-P. Chao and S. L. Chuang, Phys. Rev. B, **43**, 6530 (1991).