

P17-2005-94

М. Динейхан, С. А. Жаугашева, Ж. К. Калкозова*

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ
ПОТЕНЦИАЛА УДЕРЖАНИЯ
И КОНСТАНТЫ СВЯЗИ
СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ЭЛЕКТРОНОВ В НАНОСТРУКТУРАХ

Направлено в журнал «Физика твердого тела»

*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алма-Ата,
Казахстан

Динейхан М., Жаугашева С. А., Калкозова Ж. К. P17-2005-94
Аналитическое определение потенциала удержания
и константы связи спин-орбитального взаимодействия
электронов в наноструктурах

Многослойность нанокристаллических структур учтена с помощью электростатического поля суммарного заряда изображений, и аналитически определен потенциал удержания электронов. Предполагая, что существует такое расстояние, на котором потенциалы отталкивания и удержания электронов в квантовой точке компенсируются, взаимодействие электронов в наноструктурах определяют только спин-орбитальным взаимодействием. Исходя из этого аналитически определена константа спин-орбитального взаимодействия электронов в наноструктурах. Изучена зависимость константы спин-орбитального взаимодействия от параметров внешней среды и от расстояния между электронами.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2005

Перевод авторов

Dineykhan M., Zhaugasheva S. A., Calcozova J. K. P17-2005-94
Analytical Determination of the Confinement Potential
and Coupling Constant of Spin–Orbit Interactions
of Electrons in Nanostructures

Multilayer nanocrystalline structure is represented by the electrostatic field induced by total image charge, and the confinement potential for electrons is determined. Assuming that at a given distance the confinement potential is equal to the Coulomb repulsion and an interaction between electrons becomes spin–orbit, the constant of the spin–orbit interaction of electrons in nanostructures is determined. The dependence of the constant of the spin–orbit interaction on environment parameters and the distance between electrons is studied.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2005

ВВЕДЕНИЕ

Прогресс в современной технологии позволяет создавать полупроводниковые наноструктуры, такие как квантовые точки (КТ), квантовые проволоки [1, 2], в которых конечное число электронов удается «запереть» в ограниченном объеме порядка атомных размеров. В настоящий момент экспериментально установлено, что размеры КТ в зависимости от числа электронов, которые в ней заперты, изменяются от десятков до сотен нм.

Впервые КТ были экспериментально обнаружены в слоистой структуре [3] на границе соединений GaAs и GaAlAs, т. е. в этом случае существует два соединения, состоящие как из GaAs, так и из GaAlAs. Таким образом, учет влияния каждого слоя в механизме формирования КТ или в динамике запираания электронов КТ является одной из актуальных задач. Однако учет всех парных кулоновских взаимодействий: электронов в КТ как между собой, так и с атомами в слое — и решение соответствующего уравнения Шредингера (УШ) с формальной точки зрения, конечно, возможно, но с точки зрения численного вычисления нахождение решения УШ для таких многочастичных систем почти невозможно. Поэтому для решения такой задачи часто применяется эффективный метод решения. Одним из таких методов является введение эффективного потенциала запираания электронов в КТ, т. е. введение потенциала параболического конфайнмента (см. в [4]).

Однако на расстояниях от десятков до сотен нм между атомами и молекулами действуют только кулоновские силы. Кулоновский потенциал отличается от потенциала параболического конфайнмента. В работе [5] вводится заряд изображений, который обусловлен большой разностью диэлектрических проницаемостей слоев, и, таким образом, определен эффективный потенциал удержания между двумя электронами в КТ, т. е. учтен эффект только одного слоя. В эксперименте установлено, что для возникновения КТ нужно по крайней мере два слоя. Таким образом, при изучении механизма формирования и динамики взаимодействия электронов в КТ необходимо учесть многослойность системы.

В данной работе для объяснения механизма взаимодействия электронов в КТ мы исходим из следующего предположения: во-первых, при описании механизма формирования КТ квантово-механические эффекты играют существенную роль; во-вторых, нужно учитывать влияние не менее двух слоев; каждый слой и каждая КТ являются по диэлектрическим свойствам однородной, а в целом система является неоднородной 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 [6]. Таким образом, мы предполагаем, что существенную роль при формировании потенциала удержания играет заряд изображений, обусловленный большой разностью диэлектрических проницаемостей слоев, которые формируют КТ, например: вакуум и полупроводник или полупроводник и диэлектрик (подробно см. [7]). Исходя из этих предположений определяется эффективный потенциал удержания.

С другой стороны, в последние годы интенсивно развивается изучающая явления в низкоразмерных системах (наноструктурах) так называемая «спинтроника» [8]. Основную идею этих исследований можно выразить следующим образом: «спин вместо заряда», т. е. взаимодействие между электронами в наноструктурах определяется спин-орбитальным взаимодействием электронов. Другими словами, основное взаимодействие между электронами в КТ становится спин-орбитальным взаимодействием. Таким образом, для использования наноструктур в новых технологиях ведутся поиски различных способов управления спиновой степенью свободы электронов в КТ. С этим связывают надежды на создание новых приборов. Возникает естественный вопрос, при каких условиях взаимодействия между электронами в низкоразмерных системах (наноструктурах), в частности КТ, определяются рашба-потенциалом [9], т. е. при каких условиях напряженность спин-орбитального взаимодействия становится доминирующей над кулоновским взаимодействием между электронами в КТ, которое вызвано зарядом электрона.

Наша работа посвящена изучению этих проблем в рамках метода осцилляторного представления (ОП) [10]. Работа построена следующим образом: раздел 1 посвящен определению вида гамильтониана взаимодействия относительно движений. В разделе 2 изложены некоторые детали метода двухцентрового адиабатического приближения. В разделе 3 вычислена энергия внутренней системы в рамках ОП. В разделе 4 проанализировано поведение дополнительного потенциала взаимодействия. В разделах 5 и 6 аналитически определена константа спин-орбитального взаимодействия и ее зависимость от различных параметров структуры, которые, в свою очередь зависят от конкретного нанокристаллического соединения, и в заключении подытожены полученные основные результаты.

1. ГАМИЛЬТониАН ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В КТ С УЧЕТОМ СТРУКТУРНОСТИ СРЕДЫ

Одной из актуальных проблем при изучении структурных характеристик нанокристаллических структур является учет влияния неоднородности среды. В частности, при изучении механизма формирования двухэлектронной КТ, которая образована на границе соединений GaAs и GaAlAs, необходимо изучить

свойство трехслойной системы. Взаимодействие между различными слоями в неоднородных средах осуществляется введением заряда изображений [6, 7], а взаимодействие внутри каждого (в частности, однородного) слоя осуществляется парными кулоновскими силами. Таким образом, если КТ образуется на границе между различными слоями, то взаимодействие между слоями осуществляется с учетом заряда изображений. Диэлектрические проницаемости первого и второго слоя обозначим ε_1 и ε_2 соответственно, а диэлектрическую проницаемость квантовой ямы — ε . Тогда заряд изображений слоев определяется в следующем виде [7]:

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

где $Q^{(1)}$ и $Q^{(2)}$ — некоторые положительные постоянные, характеризующие электростатические свойства первого и второго слоя. Из (1) видно, что если среда однородная, то заряд изображений равен нулю. С другой стороны, из эксперимента известно, что КТ образуется только на границе разных слоев, а не внутри однородных систем. Введение заряда изображения объясняет механизм запираания электронов в КТ, этот эффект также называется диэлектрическим конфайнментом электронов в КТ [11].

Таким образом, мы рассмотрим четырехтелную кулоновскую систему. 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

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 m_j \dot{\mathbf{r}}_j^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_1 Z_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_1 Z_3}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_1 Z_4}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_4|} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_2 Z_3}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_2 Z_4}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4|} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Z_3 Z_4}{|\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4|}, \quad (2)$$

где ε_0 — абсолютный и ε — относительный диэлектрические проницаемости квантовой ямы. Введем координаты Якоби $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3\}$ и координаты системы центра масс \mathbf{R}_c :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \cdot \mathbf{x}_1 + \frac{m_3 + m_4}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_3 + \mathbf{R}_c; \\ \mathbf{r}_2 &= -\frac{m_1}{m_1 + m_2} \cdot \mathbf{x}_1 + \frac{m_3 + m_4}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_3 + \mathbf{R}_c; \\ \mathbf{r}_3 &= \frac{m_4}{m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_2 - \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_3 + \mathbf{R}_c; \\ \mathbf{r}_4 &= -\frac{m_3}{m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_2 - \frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \cdot \mathbf{x}_3 + \mathbf{R}_c. \end{aligned} \quad (3)$$

Подставляя (3) в (2) и производя некоторые упрощения, получим гамильтониан системы центра масс и гамильтониан относительного движения. Вид

и свойства гамильтониана центра масс детально изложены в работе [5], а гамильтониан относительного движения в этом случае записывается в следующем виде:

$$\begin{aligned}
H_{rm} = & \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{\mathbf{x}}_1^2 + \frac{1}{2} \frac{m_3 m_4}{m_3 + m_4} \dot{\mathbf{x}}_2^2 + \frac{1}{2} \frac{(m_1 + m_2)(m_3 + m_4)}{m_1 + m_2 + m_3 + m_4} \dot{\mathbf{x}}_3^2 + \\
& + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_2}{|\mathbf{x}_1|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_1 Z_3}{\left| \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{x}_1 - \frac{m_4}{m_3 + m_4} \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \right|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \times \\
& \times \frac{Z_1 Z_4}{\left| \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{x}_1 + \frac{m_3}{m_3 + m_4} \mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_3 \right|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{Z_2 Z_3}{\left| \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{x}_1 + \frac{m_4}{m_3 + m_4} \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3 \right|} - \\
& - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_2 Z_4}{\left| \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{x}_1 - \frac{m_3}{m_3 + m_4} \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_3 \right|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \cdot \frac{Z_3 Z_4}{|\mathbf{x}_2|}. \quad (4)
\end{aligned}$$

Здесь m_1 и m_2 — массы электронов в КТ, а m_3 и m_4 — массы иона (заряда изображений) первого и второго слоя. Мы предполагаем, что заряд изображений положительный и этот заряд связан с ионами в слое. Поэтому массу заряда изображений (m_3 и m_4) считаем много большей массы электрона. Для оценки порядка этих масс рассмотрим конкретный случай. Пусть КТ образована на границе соединений GaAs и GaAlAs. Тогда масса иона в этих слоях рассматривается как масса заряда изображений и она намного больше, чем масса электрона, т. е.

$$m_e \ll m_{\text{ион}}. \quad (5)$$

В соответствии с этим используем следующие приближения

$$m_1 = m_2 = m_e^*; \quad m_3 \cong m_4 = m_0. \quad (6)$$

Производя замену переменных, переходим к новым переменным

$$\mathbf{x}_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_e^*}} \cdot \mathbf{R}; \quad \mathbf{x}_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_0}} \cdot \mathbf{z}; \quad \mathbf{x}_3 = \frac{\hbar}{2\sqrt{m_e^*}} \cdot \mathbf{r}. \quad (7)$$

Тогда гамильтониан (4) перепишем в виде

$$\begin{aligned}
H_{rm} = & 2 \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{P}_R^2 + \frac{1}{2} \mathbf{P}_r^2 + \frac{1}{2} \mathbf{P}_z^2 + \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{2R} - \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{Z_3}{|\mathbf{R} + \mathbf{r} - \kappa \mathbf{z}|} - \right. \\
& - \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{Z_4}{|\mathbf{R} + \mathbf{r} + \kappa \mathbf{z}|} - \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{Z_3}{|\mathbf{R} - \mathbf{r} + \kappa \mathbf{z}|} - \\
& \left. - \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{Z_4}{|\mathbf{R} - \mathbf{r} - \kappa \mathbf{z}|} + \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{Z_3 Z_4}{2\kappa} \cdot \frac{1}{z} \right\}. \quad (8)
\end{aligned}$$

Здесь $a^* = a_b \varepsilon m_e / m_e^*$ — эффективный радиус системы; $a_b = 4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 / (m_e c^2)$ — радиус Бора; m_e^* — эффективная масса электрона (подробно см в [4]) и введено обозначение

$$\kappa = \sqrt{\frac{m_e^*}{m_0}}. \quad (9)$$

Наша задача формулируется следующим образом. Из УШ для гамильтониана, представленного в (8), определим собственное значение и собственную функцию гамильтониана. Для этого используем следующие предположения: во-первых, ионы в слоях сравнительно тяжелее электрона, а движение ограничено, и поэтому при дальнейших вычислениях будем считать, что $z = \text{const}$, т.е. $\mathbf{P}_z = 0$; во-вторых, согласно (5) параметр κ , определенный в (9), считаем малым и проводим разложение по степеням этого малого параметра. В этом приближении вектор \mathbf{z} рассматривается как внешний параметр и компоненты выражаются следующим образом: $\mathbf{z}(0, 0, z)$. Компоненты вектора \mathbf{R} выбираем в виде $\mathbf{R} \left(0, \sqrt{R^2 - (\mathbf{zR})^2 / z^2}, \sqrt{(\mathbf{zR})^2 / z^2} \right)$. Для этих векторов выполняются следующие тождества:

$$\mathbf{z}^2 = z^2; \quad \mathbf{R}^2 = R^2; \quad (\mathbf{z} \cdot \mathbf{R}) = R \cdot z \cdot \cos \alpha. \quad (10)$$

Компоненты вектора \mathbf{r} выбираем в обычной сферической системе координат. При таком выборе компоненты векторов $(\mathbf{z}, \mathbf{R}, \mathbf{r})$ различные алгебраические выражения, входящие в гамильтониан (8), записываются в следующем виде:

$$|\mathbf{R} + \mathbf{r} - \kappa \mathbf{z}| = \sqrt{(\mathbf{R} + \mathbf{r})^2 - 2\kappa(R \cdot z \cdot \cos \alpha + z \cdot r \cdot \cos \theta) + \kappa^2 z^2}. \quad (11)$$

Другие выражения определяются аналогичным образом. Теперь предполагаем, что КТ находится во внешнем постоянном магнитном поле, и также считаем, что внешнее магнитное поле и плоскость низкоразмерной твердотельной структуры пересекаются вдоль вектора \mathbf{R} (детали см. в [5]). С другой стороны, учитывая (11), гамильтониан (8) разложим по степеням малого параметра $\kappa \ll 1$, тогда гамильтониан относительного движения окончательно записывается следующим образом:

$$H_{rm} = 2 \left\{ \frac{1}{2} \mathbf{P}_R^2 + \frac{1}{2} \mathbf{P}_r^2 + \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{16} \rho_R^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} \cdot i \frac{\partial}{\partial \varphi_R} + \frac{\hbar}{2a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R} - \right. \\ \left. - \frac{\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \left[\frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right] - \frac{\hbar(Z_3 - Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{\kappa \cdot z}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|^3} \cdot (R \cos \alpha + r \cos \theta) - \frac{\kappa \cdot z}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} \cdot (R \cos \alpha - r \cos \theta) \right] \right\}. \quad (12)$$

Здесь $\omega_c = eB/(cm_e^*)$ — циклотронная частота и B — напряженность внешнего магнитного поля. Из (12) 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, 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 $\kappa \ll 1$ дипольное взаимодействие становится малым по сравнению с кулоновским взаимодействием.

2. ДВУХЦЕНТРОВОЕ АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ВНУТРЕННЕЙ СИСТЕМЫ

Электроны находятся во внешнем магнитном поле, поэтому при определении энергетических спектров и волновой функции (ВФ) гамильтониана, представленного в (12), вполне возможно применение двухцентрового адиабатического приближения [12].

Адиабатическое приближение является одним из самых распространенных методов в физике и заключается в приближенном разделении «быстрых» и «медленных» переменных динамической системы. В квантовой механике основы адиабатического приближения были заложены Борном и Оппенгеймером [13], а затем Борном и Фоком [14] для решения УШ. В данном пункте изложим детали применения двухцентрового приближения для решения УШ с гамильтонианом (12) в рамках метода ОП. УШ записывается в виде

$$\left\{ \frac{1}{2} \mathbf{P}_R^2 + \frac{1}{2} \mathbf{P}_r^2 + \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{16} \rho_R^2 - \frac{\hbar \omega_c}{4} \cdot i \frac{\partial}{\partial \varphi_R} + \frac{\hbar}{2a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R} - \right. \\ \left. - \frac{\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \left[\frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right] - \frac{\hbar(Z_3 - Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \times \right. \\ \left. \times \left[\frac{\kappa z}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|^3} (R_z + r_z) - \frac{\kappa z}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} (R_z - r_z) \right] \right\} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (13)$$

В двухцентровом приближении ВФ системы представляется в виде

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \chi(\mathbf{R}) \cdot \Phi(R, \mathbf{r}), \quad (14)$$

где $\Phi(R, \mathbf{r})$ — волновая функция внутренней системы. В двухцентровом приближении переменная R рассматривается как внешний параметр, т. е.

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

$$\Phi(R, \mathbf{r}) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{\pi}} \cdot \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z). \quad (15)$$

Здесь φ — азимутальный угол, а m — магнитное квантовое число. Учитывая (15), после некоторых упрощений для УШ из (13) имеем

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_z^2} \right] - \frac{\lambda_+}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|} - \frac{\lambda_+}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} - \frac{\lambda_-}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}|^3} (R_z + r_z) + \frac{\lambda_-}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|^3} (R_z - r_z) \right\} \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z) = E_r(R) \cdot \tilde{\Phi}_m(R; \rho, r_z), \quad (16)$$

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

$$\lambda_+ = \frac{\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}}; \quad \lambda_- = \frac{\hbar(Z_3 - Z_4)}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot (\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{z}). \quad (17)$$

Проводя замену переменных

$$\rho = 2 \cdot \sqrt{\rho_1 \rho_2}, \quad r_z = (\rho_1 - \rho_2) \quad (18)$$

и переходя к параболической системе координат, из (16) после некоторых упрощений получаем

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\rho_1 \frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \rho_2 \frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{\partial}{\partial \rho_2} - \frac{m^2}{4\rho_1} - \frac{m^2}{4\rho_2} \right] - (\rho_1 + \rho_2) E_r - \frac{\lambda_+ \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 + 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2}} - \frac{\lambda_+ \cdot (\rho_1 + \rho_2)}{\sqrt{(\rho_1 + \rho_2)^2 - 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2}} - \frac{\lambda_- \cdot (\rho_1 + \rho_2)(R_z + (\rho_1 - \rho_2))}{((\rho_1 + \rho_2)^2 + 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2)^{3/2}} + \frac{\lambda_- \cdot (\rho_1 + \rho_2)(R_z - (\rho_1 - \rho_2))}{((\rho_1 + \rho_2)^2 - 2R(\rho_1 - \rho_2) + R^2)^{3/2}} \right\} \tilde{\Phi}_m(R; \rho_1, \rho_2) = 0. \quad (19)$$

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

В (19) переменная R рассматривается как внешний параметр. Обычно стандартные вычисления проводят в вытянутых сфероидальных координатах [15], при этом параметр R определяет фокусное расстояние, а $E_r(R)$

называется термом энергетических уровней. В вытянутых сфероидальных системах координаты УШ, представленные в (19), допускают разделение переменных и получается два уравнения, которые решаются только методами численных вычислений (подробно см. в [12, 16]). В данной работе для определения энергетического термина $E_r(R)$ применим метод ОП.

3. ДВУХЦЕНТРОВОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ ОП

Для определения энергетического термина $E_r(R)$ из (19) применим метод ОП. Перед тем как определить энергетический спектр и волновую функцию из УШ (19) с помощью метода ОП [10], 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 [10]. Отметим, что впервые похожая идея обсуждалась Фоком при решении задачи о спектре атома водорода с помощью трансформации в четырехмерном пространстве импульсов [17].

Следуя Фоку [18], будем считать асимптотическое поведение волновой функции внутренней системы кулоновским. В соответствии с изложенным выше проведем замену переменных следующим образом (детали см. в [10]):

$$\rho_k = q_k^2; \quad \tilde{\Phi}_m = q_1^{|m|} q_2^{|m|} \Psi_m(q_1^2, q_2^2), \quad k = 1, 2. \quad (20)$$

Используя атомную систему единиц ($\hbar = 1$, $e = 1$, $c = 1$), получим из (19) для УШ

$$\left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial q_j^2} + \frac{d-1}{q_j} \cdot \frac{\partial}{\partial q_j} \right] - \frac{4\lambda_+(q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2}} - \right.$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{4\lambda_+(q_1^2 + q_2^2)}{\sqrt{(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2}} - \frac{4\lambda_-(q_1^2 + q_2^2)(R + (q_1^2 - q_2^2))}{[(q_1^2 + q_2^2)^2 + 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2]^{3/2}} - \\
& - 4E_r(q_1^2 + q_2^2) + \frac{4\lambda_-(q_1^2 + q_2^2)(R - (q_1^2 - q_2^2))}{[(q_1^2 + q_2^2)^2 - 2R(q_1^2 - q_2^2) + R^2]^{3/2}} \left. \right\} \Psi_m(q_1^2, q_2^2) = 0, \quad (21)
\end{aligned}$$

где d — размерность вспомогательного пространства, которая равна

$$d = 2 + 2|m|. \quad (22)$$

В результате замены переменных мы получили модифицированное УШ в d -мерном вспомогательном пространстве R^d . Из (21) и (22) 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

$$\frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + \frac{d-1}{q_k} \frac{\partial}{\partial q_k} \equiv \Delta_{q_k}, \quad k = 1, 2, \quad (23)$$

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:

$$H\Psi_m(q_1, q_2) = \varepsilon(E_r)\Psi_m(q_1, q_2), \quad (24)$$

согласно (21), мы получаем, что энергетический спектр в R^d равен нулю:

$$\varepsilon(E_r) = 0. \quad (25)$$

Будем рассматривать это соотношение как условие определения энергетического спектра E_r исходного гамильтониана (16). Следуя методу ОП, представим канонические переменные через операторы рождения a_j^+ и уничтожения a_j в d -мерном пространстве:

$$\begin{aligned}
q_j^{(k)} &= \frac{a_j^k + a_j^{k+}}{\sqrt{2\omega_k}}; & P_j^{(k)} &= \sqrt{\frac{\omega_k}{2}} \frac{a_j^k - a_j^{k+}}{i}; \\
k &= 1, 2; & j &= 1, \dots, d, & [a_i^k, a_j^{k+}] &= \delta_{i,j},
\end{aligned} \quad (26)$$

где ω_k — частота осциллятора, которая пока неизвестна. Подставляя (26) в (21) и проводя упорядочивание по операторам рождения и уничтожения, получаем

$$H = H_0 + \varepsilon_0(E_r) + H_I. \quad (27)$$

Здесь H_0 является гамильтонианом двух несвязанных осцилляторов

$$H_0 = \omega_1(a_j^+(1) \cdot a_j(1)) + \omega_2(a_j^+(2) \cdot a_j(2)), \quad (28)$$

а $\varepsilon_0(E_r)$ — энергия основного состояния в нулевом приближении ОП [10], которая имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(E_r) = & \frac{d}{4}(\omega_1 + \omega_2) - \frac{2dE_r}{\omega_1} - \frac{2dE_r}{\omega_2} - 4(\omega_1\omega_2)^{d/2} \cdot e^{-\beta_1\omega_1 - \beta_2\omega_2} \times \\ & \times \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} \left[\frac{\lambda_+(\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 + 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2}} + \right. \\ & \left. + \frac{\lambda_+(\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} (\beta_1 + \beta_2)}{\sqrt{(\beta_1 + \beta_2)^2 - 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2}} \right] - 4(\omega_1\omega_2)^{d/2} \cdot e^{-\beta_1\omega_1 - \beta_2\omega_2} \times \\ & \times \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{d\beta_1 d\beta_2}{\Gamma^2(d/2)} (\beta_1 \cdot \beta_2)^{d/2-1} \left[\frac{\lambda_-(\beta_1 + \beta_2) \cdot (R + (\beta_1 - \beta_2))}{((\beta_1 + \beta_2)^2 + 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2)^{3/2}} - \right. \\ & \left. - \frac{\lambda_-(\beta_1 + \beta_2) \cdot (R - (\beta_1 - \beta_2))}{((\beta_1 + \beta_2)^2 - 2R(\beta_1 - \beta_2) + R^2)^{3/2}} \right]. \quad (29) \end{aligned}$$

Гамильтониан взаимодействия H_1 также представляется в нормальной форме по операторам рождения и уничтожения, причем он не содержит квадратичных слагаемых по каноническим переменным (подробно см. в [5, 10]).

Вклад гамильтониана взаимодействия H_1 рассматривается как малое возмущение. В квантовой теории поля (КТП), когда канонические переменные выражены через операторы рождения и уничтожения и гамильтониан взаимодействия представлен в нормальной форме, требование отсутствия в гамильтониане взаимодействия полевых операторов второй степени, по существу, эквивалентно перенормировке константы связи и волновой функции [19]. Более того, такая процедура позволяет учесть основной квантовый вклад через перенормировку массы и энергии вакуума. Другими словами, все квадратичные формы полностью включены в гамильтониан свободного осциллятора. Данное требование позволяет сформулировать условие (согласно методу ОП)

$$\frac{\partial \varepsilon_0(E_r)}{\partial \omega_1} = 0, \quad \frac{\partial \varepsilon_0(E_r)}{\partial \omega_2} = 0 \quad (30)$$

для нахождения частоты ω_1 и ω_2 несвязанных осцилляторов, которые определяют основной квантовый вклад. Учитывая (29), из уравнений (25) и (30) 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 [10] 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 в ОП.

При дальнейших вычислениях проводим замену переменных

$$\beta_1 = \frac{t+s}{\sqrt{2}}; \quad \beta_2 = \frac{t-s}{\sqrt{2}}. \quad (31)$$

После некоторых упрощений из (29) имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(E_r) &= \frac{d}{2}\omega_+ - \frac{2dE_r\omega_+}{\omega_+^2 - \omega_-^2} - 4\lambda_+(\omega_+^2 - \omega_-^2)^{d/2}Q_+(R) + \\ &+ 4\lambda_-(\omega_+^2 - \omega_-^2)^{d/2}\frac{\partial}{\partial R}Q_-(R). \end{aligned} \quad (32)$$

Здесь использованы следующие обозначения

$$\omega_{\pm} = \frac{\omega_1 \pm \omega_2}{2}; \quad Q_{\pm}(R) = T_+(R) \pm T_-(R), \quad (33)$$

где

$$T_{\pm}(R) = \int_0^{\infty} \frac{dt \cdot t^d}{\Gamma^2(\frac{d}{2})} \cdot \int_{-1}^1 dx \frac{(1-x^2)^{\frac{d}{2}-1} e^{-\omega_+ t - \omega_- t x}}{\sqrt{t^2 \pm 2R \cdot x + R^2}}. \quad (34)$$

Если будем ограничиваться только первым порядком параметра κ , то при $R = 0$ и $R = \infty$ из (30) имеем $\omega_1 = \omega_2$, т. е. в этом приближении $\omega_- = 0$. Поэтому при вычислении интеграла, представленного в (34), проведем разложение по степеням ω_- и будем ограничиваться низшими порядками. Рассмотрим основное состояние, т. е. $m = 0$, тогда из (22) имеем $d = 2$. Исходя из этих предположений, после простых вычислений, учитывая (34), получаем

$$\begin{aligned} Q_+(R) &= \frac{2R^2}{\Omega^2} \left(2 \frac{1 - e^{-\Omega}}{\Omega} - e^{-\Omega} \right) + O(\omega_-^2); \\ Q_-(R) &= \frac{2\omega_- R^3}{\Omega^2} \left[8 \frac{1 - e^{-\Omega}}{\Omega^3} \cdot \frac{8e^{-\Omega}}{\Omega^2} - \frac{4e^{-\Omega}}{\Omega} - e^{-\Omega} \right], \end{aligned} \quad (35)$$

где $\Omega = \omega_+ R$. Подставляя (35) в (32) и из уравнений (25) и (30) для энергетического спектра внутренней системы имеем

$$\begin{aligned} E_r(R) &= \frac{\omega_+^2}{4} - \frac{\omega_0 \cdot \omega_+}{2} \left(2 \frac{1 - e^{\omega_+ R}}{\omega_+ R} - e^{-\omega_+ R} \right) + \\ &+ \frac{16}{27} \omega_0^2 \lambda_-^2 (3 \cos^2 \alpha - 1) \cdot \left(1 - \frac{29}{3} \omega_0^2 R^2 \right). \end{aligned} \quad (36)$$

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

$$\omega_+ - \omega_0(1 + \omega_+R)e^{-\omega_+R} = 0. \quad (37)$$

При определении энергетического спектра и ВФ двух электронов в КТ, т. е. внешней системы, энергетический спектр внутренней системы рассматривается как дополнительный потенциал взаимодействия. Из (36) видно, что появляется потенциал взаимодействия, связанный с квадрупольным моментом. Однако это взаимодействие пропорционально квадрату малого параметра κ , поэтому при дальнейших вычислениях мы не будем его учитывать.

4. ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В КТ

Приступим к определению волновой функции и энергетических спектров двухэлектронной КТ. Для этого проводим усреднение по волновой функции внутренней системы. Учитывая (14), (16) и проводя простые упрощения из (13) имеем

$$\left\{ \mathbf{P}_R^2 + \frac{\hbar^2}{2} \cdot \frac{\omega_c^2}{8} \rho_R^2 + \frac{\hbar\omega_c}{2} L_{\varphi R} + V_{\text{tot}}(R) \right\} \chi(\mathbf{R}) = E \cdot \chi(\mathbf{R}), \quad (38)$$

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

$$V_{\text{tot}} = \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R} + 2E_r(R) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\omega_+} \cdot \frac{\partial \omega_+}{\partial R} \right)^2. \quad (39)$$

Здесь первое слагаемое в (39) является кулоновским потенциалом взаимодействия электронов в КТ, а $E_r(R)$ — потенциал, создаваемый электростатическим полем заряда изображений, который при дальнейших исследованиях используется в виде

$$E_r^{(0)}(R) = \frac{\omega_+^2}{2} - \omega_0\omega_+ \left(2 \frac{1 - e^{-\omega_+R}}{\omega_+R} - e^{-\omega_+R} \right), \quad (40)$$

т. е. без учета квадрупольного взаимодействия. Третье слагаемое в (39) связано с относительным движением электронов в КТ, его вклад по сравнению $E_r^{(0)}(R)$ на порядок меньше [5] и при дальнейших исследованиях он также не будет учитываться. В (40) частота осциллятора ω_+ определяется из уравнений (37). Таким образом, все параметры потенциала определены и он состоит из двух частей. Для понимания характера потенциала (40) рассмотрим предельный случай. Пусть $R \ll 1$, тогда учитывая (37), из (40) получаем

$$E_r^{(0)}(R) = \frac{\omega_0^2}{2} \left(-1 + \frac{1}{3} \omega_0^2 R^2 + O(R^4) \right), \quad (41)$$

а при $R \rightarrow \infty$, $E_r^{(0)}(R) \Rightarrow 0$. Таким образом, при малых расстояниях ($R \ll 1$) электростатический потенциал, созданный зарядом изображений, является потенциалом параболического конфайнмента, т. е. растущим потенциалом. Тогда потенциал (39) перепишем в виде

$$V = V_V(R) + V_S(R), \quad (42)$$

где V_V — стандартный векторный потенциал, связанный с однофотонным обменом

$$V_V = \frac{\hbar}{a^* \sqrt{m_e^*}} \cdot \frac{1}{R}, \quad (43)$$

и V_S — потенциал запираия электронов в КТ:

$$V_S = \frac{\omega_+^2}{2} - \omega_0 \omega_+ \left(2 \frac{1 - e^{-\omega_+ R}}{\omega_+ R} - e^{-\omega_+ R} \right). \quad (44)$$

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

5. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В КТ

В (42) мы определили потенциал взаимодействия электронов в КТ. Потенциал взаимодействия состоит из двух частей; V_V — векторный потенциал, соответствующий однофотонному обмену, и V_S — потенциал запираия с учетом полной ангармонической поправки (44). При определении потенциала (42) 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 запираия. Спин-орбитальное взаимодействие фермионов с аналогичным потенциалом взаимодействия хорошо изучено и определено в физике элементарных частиц (в нерелятивистском феноменологической модели кваров), т. е. гамильтониан спин-орбитального взаимодействия кварков равен (детали см. в [20])

$$H_{SL} = \frac{1}{2m_1 \cdot m_2} \cdot \frac{1}{x} \cdot \left[3 \cdot \frac{d}{dx} V_V(x) - \frac{d}{dx} V_S(x) \right] (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}). \quad (45)$$

Здесь V_V — векторный потенциал, соответствующий однофотонному обмену; V_S — растущий потенциал, который обеспечивает запираие кварков; x — расстояния между кварками и m_1, m_2 — массы кварков.

В нашем случае гамильтониан спин-орбитального взаимодействия электронов в КТ также определяется гамильтонианом спин-орбитального взаимодействия, который представлен в (45).

Учитывая (7) переходим к новым переменным. Из (45) для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия двух электронов в КТ имеем

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^*\hbar^2} \cdot \frac{1}{R} \cdot \left[3 \cdot \frac{d}{dR} V_V(R) - \frac{d}{dR} V_S(R) \right] \cdot (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}), \quad (46)$$

где $V_V(R)$ — векторный потенциал, а $V_S(R)$ — потенциал запираания электронов в КТ, который представлен в (43) и (44) соответственно. В (44) параметр ω_+ определяется из уравнений (37). В (46) \mathbf{L} — оператор орбитального момента, определенный стандартным образом:

$$\hbar\mathbf{L} = [\mathbf{x} \times \mathbf{P}_x] = -i\hbar[\mathbf{x} \times \nabla_x]; \quad \mathbf{L} = -i[\mathbf{R} \times \nabla_R], \quad (47)$$

а \mathbf{S} — оператор спина, и существует тождество

$$(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) = i(\mathbf{R} \cdot [\mathbf{S} \times \nabla_R]). \quad (48)$$

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

$$V_{\text{tot}}(R) = V_V(R) + V_S(R) + H_{SL}(R). \quad (49)$$

Теперь определим условия, при которых взаимодействие электронов в КТ определяется только спин-орбитальным взаимодействием. 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

$$V_V(R_0) + V_S(R_0) = 0. \quad (50)$$

Из этого уравнения определим R_0 как функцию от эффективной массы электрона, эффективного радиуса Бора и суммарного заряда изображения $Z_3 + Z_4$. Учитывая (50), проводя необходимые упрощения, из (46) для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия электрона в КТ имеем

$$H_{SL} = \frac{1}{m_e^*\hbar^2} \cdot \left[\frac{\omega_+^2}{4R_0} - \frac{2}{R_0^2} \cdot \frac{\hbar}{a^*\sqrt{m_e^*}} \right] \cdot \frac{1}{R_0} \cdot i(\mathbf{R}_0 \cdot [\mathbf{S} \times \nabla_{R_0}]), \quad (51)$$

где ω_+ определяется из уравнений (37), а R_0 — из уравнений (50). Тогда, переходя к безразмерным переменным

$$\begin{aligned} \omega_+ &= \omega_0\eta, & R_0 &= \frac{\tau}{\omega_0}, \\ \omega_0 &= 4\lambda_+ = \frac{4\hbar(Z_3 + Z_4)}{a^*\sqrt{m_e^*}} \equiv \frac{4(Z_3 + Z_4)\sqrt{m_e^*}}{\hbar} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \end{aligned} \quad (52)$$

и подставляя (52) в (51), после некоторых упрощений имеем

$$H_{SL} = \frac{1}{m_e^* \hbar^2} \cdot \frac{\omega_0^4}{4\tau^3(Z_3 + Z_4)} \cdot [\tau\eta^2(Z_3 + Z_4) - 2] \cdot i(\mathbf{R}_0 \cdot [\mathbf{S} \times \nabla_R]). \quad (53)$$

Здесь τ, η — безразмерные переменные, которые, учитывая (52), (37) и (50), определяют из следующей системы уравнений

$$\begin{cases} \frac{1}{8Z_{\text{tot}}} \frac{1}{\tau} + \frac{\eta^2}{4} - \frac{1 - e^{-\eta\tau}}{\tau} + \frac{\eta}{2} e^{-\eta\tau} = 0, \\ \eta - (1 + \eta\tau)e^{-\eta\tau} = 0. \end{cases} \quad (54)$$

Из этой системы уравнений η, τ определяются как функции от суммарного заряда изображения $Z_{\text{tot}} = Z_3 + Z_4$. Учитывая (7) и определение спиновых ($\mathbf{S} = 1/2 \cdot \boldsymbol{\sigma}$) и импульсных ($\mathbf{P}_x = -i\nabla_x$) операторов, а также выделяя размерность параметра, т. е. K_{SO} — эффективную константу спин-орбитального взаимодействия, из (53) для гамильтониана спин-орбитального взаимодействия получаем

$$H_{SL} = K_{SO}(\sigma_x P_y - \sigma_y P_x), \quad (55)$$

где σ — матрица Паули и

$$K_{SO} = \frac{1}{2} m_e \alpha_{em}^2 \cdot r_e \cdot \frac{1}{\varepsilon} \frac{1}{x_b^2} [2 - \tau\eta^2 Z_{\text{tot}}] \left(\frac{m_e}{m_e^*} \right)^2, \quad (56)$$

где α_{em} — стандартная константа связи электромагнитного взаимодействия, а $0,5m_e\alpha_{em}^2 = 13,605698$ эВ — стандартная энергия Ридберга; $r_e = e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e = 2,81794 \cdot 10^{-15}$ 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

$$x_b = \frac{x}{a_b} = \tau \cdot \frac{\varepsilon}{4Z_{\text{tot}}} \cdot \left(\frac{m_e}{m_e^*} \right)^2. \quad (57)$$

Тогда окончательно из (56) для эффективной константы спин-орбитального взаимодействия имеем

$$K_{SO} = 0,06134 \cdot \left(\frac{m_e}{m_e^*} \right)^2 \cdot \frac{Z_{\text{tot}}^2}{\varepsilon^3 \tau^2} [2 - \tau \cdot \eta^2 Z_{\text{tot}}] [10^{-11} \text{ эВ} \cdot \text{м}]. \quad (58)$$

Таким образом, из (57) и (58) 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, конечно, зависит от конкретной структуры нанокристалла. 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.

6. ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ КОНСТАНТЫ СВЯЗИ ДЛЯ КОНКРЕТНЫХ НАНОСТРУКТУР

В этом разделе, используя полученные аналитические выражения для эффективной константы (58), 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 запирания электронов в КТ. Из (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 сильно влияет на их электрические и оптические свойства. Такими наноструктурами являются: полупроводниковые нанокристаллы [21] или квантовые нити [22] в диэлектрической матрице, а также пористый кремний [23] и др. Из (1) следует, что для того чтобы заряд изображений был положительным, диэлектрическая проницаемость квантовой ямы и КТ всегда должны быть меньше, чем диэлектрическая проницаемость слоев, т. е.

$$\varepsilon < \varepsilon_1 \text{ и } \varepsilon < \varepsilon_2. \quad (59)$$

Поэтому диэлектрическую проницаемость КТ мы должны выбрать таким образом, чтобы она удовлетворяла условию (59). 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 [24]. Поэтому K_{SO} зависит от электронной плотности слоев и линейного размера КТ.

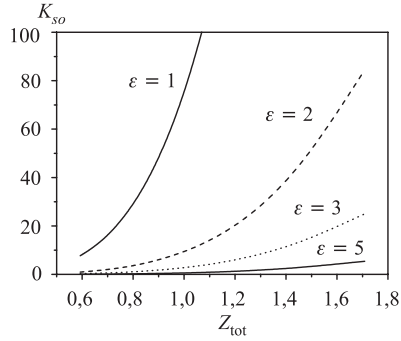


Рис. 1. Зависимость константы связи спин-орбитального взаимодействия от суммы зарядов изображений. Константа связи в единицах 10^{-11} эВ·м

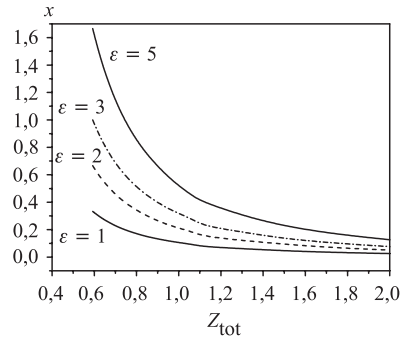


Рис. 2. Зависимость расстояния между электронами в КТ от суммы зарядов изображений. Расстояния между электронами в единицах радиуса Бора

Рассмотрим двухэлектронную КТ, которая образована на границе соединений GaAs и GaAlAs. Диэлектрическая проницаемость этих соединений в зависимости от размера КТ (подробно см. [11, 25]):

$$\varepsilon_{\text{GaAs}} = 6,1; \quad 13, \quad (60)$$

а эффективная масса электрона равна $m_e^* = 0,067m_e$. Согласно (59) и учитывая (60), выбираем диэлектрическую проницаемость КТ в интервале

$$\varepsilon = \varepsilon_w = 1-5. \quad (61)$$

Зависимость эффективной константы связи спин-орбитального взаимодействия K_{SO} (58) при конкретных значениях эффективной массы электрона от Z_{tot} — суммы заряда изображений — аналитически определена и представлена на рис. 1. Из рис. 1 видно, что с возрастанием Z_{tot} K_{SO} также увеличивается. При малых значениях диэлектрической проницаемости КТ возрастание константы связи спин-орбитального взаимодействия становится резким. Зависимости расстояния между электронами x , на котором происходит взаимное сокращение векторных и скалярных потенциалов, от Z_{tot} представлены на рис. 2. 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 рис. 3 представлена зависимость K_{SO} от расстояния между электронами, которое определено из условия усиления спин-орбитальных взаимодействий между электронами в КТ. Из рис. 3 также видно, что с увеличением x при конкретных значениях диэлектрической проницаемости, т. е. для конкретного соединения наноструктуры, K_{SO} уменьшается.

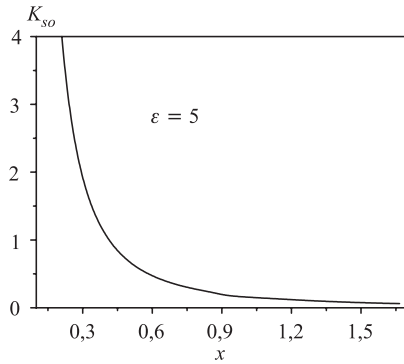


Рис. 3. Зависимость константы связи спин-орбитального взаимодействия от расстояния между электронами в КТ. Константа связи в единицах 10^{-11} эВ·м. Расстояния между электронами в единицах радиуса Бора

проницаемость соединения. Мы уверены, что экспериментально определить значения этих параметров для конкретных соединений, в частности для GaAs и GaAlAs, не так трудно.

Эффективная константа спин-орбитального взаимодействия для структуры InGaAs с эффективной массой электрона $m^* = 0,042m_e$ экспериментально определена в [26]: $K_{SO} = 1,5 \cdot 10^{-11}$ эВ·м. Из нашего аналитического результата при значении параметров $\varepsilon = 3$ и $Z_{tot} = 0,68$, из (58) 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 про-

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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. Именно учет кулоновских парных взаимодействии между электронами и зарядами изображений приводит к созданию электростатического поля суммарного заряда изображений.

Показанно, что полный потенциал взаимодействия электронов в КТ состоит из двух частей: потенциала однофотонного обмена и потенциала удержания электронов в КТ. Вектор-потенциал для электронов в КТ является обычным отталкивающим кулоновским потенциалом. Предполагая, что существует такое расстояние, на котором потенциалы отталкивания и удержания электронов в КТ компенсируются, взаимодействие электронов в КТ определяют только спин-орбитальным взаимодействием. Исходя из этих предположений аналитически определена константа спин-орбитального взаимодействия электронов в наноструктурах. Изучена зависимость константы спин-

орбитального взаимодействия от зарядов изображений и от расстояния между электронами.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chakraborty T.* // Comm. Cond. Matt. Phys. 1992. V. 16. P. 35;
Kastner M.A. // Phys. Today. 1993. V. 46. P. 24; *Jacak L., Hawrylak P., Wojs A.* Quantum Dots. Berlin: Springer Verlag, 1997.
2. *Turton R.* The Quantum Dot, A Journey into Future Microelectronics. New York: Oxford University Press, 1995.
3. *Ashoori R. C. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 71. P. 613;
Ashoori R. C. // Nature (London). 1996. V. 379. P. 413.
4. *Maksym M., Chakraborty T.* // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 108; Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 1947;
Merkt U., Huser J., Wagner M. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 7320;
Wagner M., Merkt U., Chaplik A. V. // Phys. Rev. B. 1992. V. 45. P. 1951;
Dineykhon M., Nazmitdinov R. G. // Phys. Rev. B. 1997. V. 55. P. 13707; J. Phys.: Cond. Matt. 1999. V. 11. P. 83.
5. *Динейхан М., Жаугашева С. А., Назмитдинов Р. Г.* // ЖЭТФ. 2001. V. 119. P. 1210.
6. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982.
7. *Гиппиус Н. А., Кулаковский В. Д., Тиходеев С. Г.* // УФН. 1997. Т. 167. С. 558.
8. *Wolf S. A. et al.* // Science. 2001. V. 294. P. 1488.
9. *Rashba E. I.* // Phys. Rev. B. 2000. V. 62. P. 16267;
Рашиба Э. И. // ФТТ. 1960. Т. 2. С. 1224;
Бучков Я. А., Rashba E. I. // ЖЭТФ. 1984. V. 39. P. 78;
Rashba E. I., Shoka V. I. Landau. Level Spectroscops / Eds. G. Landwehr and E. I. Rashba. Elsevier, 1991. P. 178.
10. *Динейхан М., Ефимов Г. В.* // ЭЧАЯ. 1995. Т. 26. С. 651;
Dineykhon M. et al. Oscillator representation in quantum physics // Lecture Notes in Physics. m 26. Berlin: Springer Verlag, 1995.
11. *Муляров Е. А., Тиходеев С. Г.* // ЖЭТФ. 1997. Т. 111. С. 274.
12. *Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, М.: Наука, 1976;
Виницкий С. И., Пономарев Л. И. // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336.
13. *Born M., Oppenheimer R.* // Ann. D. Phys. 1927. Bd. 84. S. 457.

14. *Born M., Fock V.* // *Z. Phys.* 1928. Bd. 51. S. 165.
15. *Abramowitz M., Stegun I.A.* Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, National bureau of Standards Applied Mathematics, Series, 1964.
16. *Соловьев Е. А.* // *УФН.* 1989. Т. 157. С. 437;
Jaffe G. // *Z. Phys.* 1934. V. 87. P. 535;
Beber W. G., Hasse H. R. // *Proc. Cambr. Philos. Soc.* 1935. V. 31. P. 564;
Bates D. R., Ledsham K., Stewart A. L. // *Phil. Trans. Roy. Soc. A.* 1953. V. 246. P. 215.
17. *Фок В. А.* Начало квантовой механики. М.: Наука, 1976.
18. *Фок В. А.* // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1954. Т. 18. С. 161.
19. *Fradkin E. S.* // *Nucl. Phys.* 1963. V. 49. P. 624;
Hayashi K. et al. // *Fortschr. Phys.* 1967. V. 15. P. 625;
Salam A. Nonpolynomial Lagrangians. Renormalization and Gravity. N. Y.: Gordon and Breach Science Publ., 1971.
20. *Lucha W., Schoberl F., Gromes D.* // *Phys. Rep.* 1991. V. 200. P. 127.
21. *Голубков В. В., Екимов А. И., Онущенко А. А.* // *Физ. хим. стекла.* 1980. Т. 6. С. 511;
Эфрос Ал. А., Эфрос А. Л. // *ФТП.* 1982. Т. 16. С. 1209;
Bawendi M. G. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 65. P. 1623;
Ekimov A. I., Efros Al. L., Onushenko A. A. // *Sol. St. Comm.* 1993. V. 88. P. 947.
22. *Poborchii V. V., Ivanova M. S., Salamatina I. A.* // *Superlattices and Microstructures.* 1944. V. 16. P. 133;
Dneprovskii V., Gushina N., Zhukov E. // *Phys. Lett. A.* 1995. V. 204. P. 59.
23. *Canham L. T.* // *Appl. Phys. Lett.* 1990. V. 57. P. 104.
24. *Шашкин А. А.* // *УФН.* 2005. Т. 175. С. 139;
Орлов Ф. Л., Ивина Н. А. // *ФТТ.* 2004. Т. 46. С. 913.
25. *Lucovsky G. et al.* // *Sol. St. Comm.* 1976. V. 18. P. 811.
26. *Engels G. et al.* // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 55. P. 1958;
Schapers Th. et al. // *J. Appl. Phys.* 1998. V. 83. P. 4324.

Получено 27 июня 2005 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 20.07.2005.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 1,43. Уч.-изд. л. 2,02. Тираж 305 экз. Заказ № 54969.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@pds.jinr.ru

www.jinr.ru/publish/