

ОСЦИЛЛЯЦИИ ЗАРЯДА В ДВОЙНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ В УСЛОВИЯХ КУЛОНОВСКОЙ БЛОКАДЫ

В.А.Бурдов

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского
603600 Нижний Новгород, Россия

Поступила в редакцию 5 апреля 2000 г.

Рассмотрена двухэлектронная динамика в симметричной двойной квантовой точке во внешнем постоянном электрическом поле. Показано, что несмотря на кулоновскую блокаду, возможны колебания электронной плотности между квантовыми точками, при которых из одной точки в другую периодически перетекает заряд, равный заряду одного электрона.

PACS: 03.65.-w, 73.20.Dx

Изучение электронных свойств в туннельно-связанных квантовых точках – тема многочисленных работ последнего времени. В частности, исследовалось распределение заряда в таких системах [1–3], а также влияние на спектр и электронную плотность внешних постоянных магнитного [3] и электрического [2, 4] полей. В работах [5–7] обсуждалась временная эволюция одноэлектронного волнового пакета в двойной квантовой точке и периодические осцилляции заряда между точками, а в [8] эти осцилляции наблюдались экспериментально.

Вообще говоря, количество электронов в системе туннельно-связанных квантовых точек (особенно, если размеры этих точек достаточно велики – до сотен нанометров) будет существенно больше одного, что автоматически приведет к эффекту кулоновской блокады туннелирования с подавлением осцилляций заряда между точками. В настоящей работе показано, что при наложении на систему постоянного электрического поля осцилляции заряда оказываются возможными даже в условиях кулоновской блокады, но в достаточно узком интервале значений напряженности поля.

Будем рассматривать простейшую симметричную двойную квантовую точку – систему двух одинаковых туннельно-связанных квантовых точек малого размера (в несколько нанометров [9, 10], что позволит нам получать аналитические результаты) с двумя электронами, находящуюся в постоянном электрическом поле напряженностью E , направленном по оси структуры (ось z). В условиях, когда размер квантовой точки не превышает нескольких нанометров, уровни размерного квантования в изолированной квантовой точке расходятся на величину порядка 1эВ , что почти на порядок превышает характерную кулоновскую энергию взаимодействия зарядов на расстояниях, близких к размеру квантовой точки ($\sim e^2/R$). В свою очередь, кулоновская энергия оказывается также примерно на порядок выше энергии расщепления уровней Δ в двойной квантовой точке, получающегося за счет слабой туннельной связи между точками, и тепловой энергии (при комнатных температурах).

В соответствие с последним условием можно утверждать, что вся электронная динамика будет разыгрываться на двух нижних одноэлектронных уровнях $E_{0,1} = \pm\Delta/2$, получившихся в результате расщепления уровня энергии основного состояния электрона в изолированной квантовой точке. Электрическое поле бу-

дем предполагать также не настолько сильным, чтобы оно могло “подмешивать” более высокоэнергетические состояния, и поэтому в дальнейшем будем использовать двухуровневое приближение.

Оператор Гамильтона двухэлектронной системы запишем в виде

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2) + e\mathbf{E}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{\epsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (1)$$

где $\hat{H}_0(\mathbf{r})$ – одночастичный двухуровневый оператор Гамильтона в двойной квантовой точке, собственные функции которого есть $\chi_{0,1}(\mathbf{r})$, а собственные значения $\pm\Delta/2$, ϵ – диэлектрическая проницаемость среды, а заряд электрона равен $-e$. Волновую функцию естественно искать в виде разложения по двухэлектронному базису, включающему четыре ортонормированных вектора (спиновую часть опускаем):

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i,j=0}^1 C_{ij} \chi_i(\mathbf{r}_1) \chi_j(\mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где C_{ij} – постоянные коэффициенты разложения.

Сами одноэлектронные функции стационарных состояний $\chi_{0,1}(\mathbf{r})$ представляют собой соответственно симметричную и антисимметричную по координате z функции, имеющие практически одинаковые пространственные распределения: $\chi_0^2(\mathbf{r}) \approx \chi_1^2(\mathbf{r})$. Отличие функций $\chi_0^2(\mathbf{r})$ и $\chi_1^2(\mathbf{r})$ примерно определяется отношением величины энергии расщепления Δ к величине высоты потенциального барьера, что составляет значения порядка 10^{-2} (например, для кремниевых точек, помещенных в диоксид кремния [9]) или даже меньше. Далее этими различиями будем пренебрегать.

Определение двухэлектронного спектра и волновых функций стационарных состояний сводится к отысканию собственных функций (то есть коэффициентов C_{ij}) и собственных значений \mathcal{E} оператора Гамильтона (1). В результате стандартной процедуры (см., например, [11]) приходим к следующему уравнению для энергии:

$$(\epsilon + V) [(\epsilon + V)(\epsilon - V)^2 - 4W^2(\epsilon + V) - (\epsilon - V)\Delta^2] = 0, \quad (3)$$

где $\epsilon = \mathcal{E} - U$, а U и V – парные (двухчастичные) матричные элементы оператора кулоновского взаимодействия $\hat{V} = e^2/\epsilon|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, причем $U = V_{00}^{00} = V_{11}^{11} = V_{11}^{00} = V_{00}^{11}$, а $V = V_{01}^{01} = V_{01}^{10} = V_{10}^{01} = V_{10}^{10}$ (нижние индексы соответствуют номерам волновых функций электрона 1, а верхние – электрона 2). Одночастичный недиагональный матричный элемент оператора потенциальной энергии электрона во внешнем электрическом поле, обозначенный в (3) через W , равен eEz_{01} .

Несложный анализ уравнения (3) показывает (в самом грубом приближении можно пренебречь слагаемым, содержащим Δ^2), что энергия третьего возбужденного состояния отделена широкой щелью (порядка $2V \sim e^2/R$) от нулевого и первого уровней, увеличивающейся с ростом электрического поля. При невысоких температурах (меньших или порядка комнатных) этот уровень окажется не заселенным, поэтому его мы рассматривать не будем. Напротив, энергия второго возбужденного состояния понижается с ростом поля и подходит достаточно близко к двум нижним уровням в окрестности точки $W = V$, образуя тройку уровней, которые могут быть заселены. Рассмотрим поведение энергий и волновых функций стационарных состояний в окрестности этой точки более подробно.

Задав небольшие отклонения значений W от V , а ϵ от $-V$ и учитывая малость значения Δ по сравнению с V , сведем уравнение четвертой степени к уравнению третьей степени, распадающемуся на линейное и квадратное, в результате чего получим следующие выражения для энергий трех низших состояний:

$$\mathcal{E}_1 = U - V, \quad \mathcal{E}_{0,2} = U - W \mp \sqrt{(W - V)^2 + \Delta^2/2}, \quad (4)$$

причем выражение для \mathcal{E}_1 является точным. На рис.1 показаны ветви энергий первых трех состояний в зависимости от отношения W/V , пропорционального напряженности внешнего электрического поля. Видно, что ветви энергий основного и второго возбужденного состояний как бы отталкиваются друг от друга (так называемый антикроссинг уровней), асимптотически приближаясь соответственно при $V - W \gg \Delta$ и $W - V \gg \Delta$ к ветви первого возбужденного состояния.

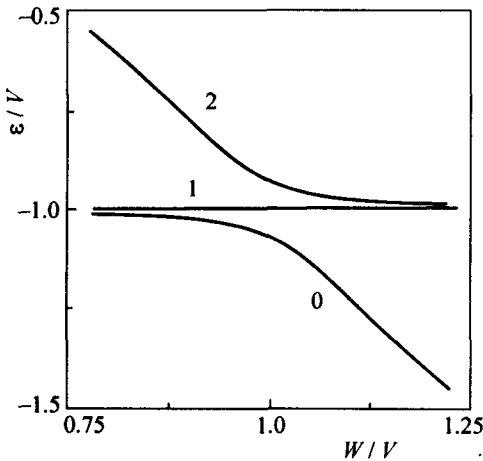


Рис.1. Энергии основного (0), первого и второго возбужденных состояний (1 и 2) при $\Delta/V = 0.1$

Волновые функции основного и двух возбужденных состояний принимают вид

$$\begin{aligned} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} [\chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2) - \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2)] + \\ &+ \frac{\cos \alpha}{2} [\chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2) + \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) - \chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) - \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2)], \\ \Psi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{\chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) - \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2)}{\sqrt{2}}, \\ \Psi_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{\cos \alpha}{\sqrt{2}} [\chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2) - \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2)] - \\ &- \frac{\sin \alpha}{2} [\chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2) + \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) - \chi_0(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) - \chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_0(\mathbf{r}_2)], \end{aligned} \quad (5)$$

где угол α определен посредством соотношений

$$\cos 2\alpha = \frac{W - V}{\sqrt{(W - V)^2 + \Delta^2/2}}, \quad \sin 2\alpha = \frac{\Delta/\sqrt{2}}{\sqrt{(W - V)^2 + \Delta^2/2}}$$

и изменяется в пределах от нуля до $\pi/2$ при изменении разности $W - V$ от $+\infty$ до $-\infty$.

Волновые функции основного и второго возбужденного состояний, как следует из (5), являются симметричными относительно перестановок частиц и, в отличие от антисимметричной функции первого возбужденного состояния, выражение для которой, также как и выражение для энергии \mathcal{E}_1 , является строгим, зависят от величины напряженности приложенного электрического поля. Энергии этих состояний также зависят от внешнего поля, в отличие от энергии первого возбужденного состояния.

То, что энергия и волновая функция первого состояния не зависят от электрического поля, объясняется использованием нами двухуровневого одноэлектронного приближения, которое в итоге приводит лишь к четырем двухэлектронным состояниям, три из которых являются симметричными (несложно показать, что третье возбужденное состояние также симметрично), а одно – антисимметричным. Поскольку, в силу принципа тождественности частиц, волновая функция системы и во внешнем электрическом поле также должна быть либо строго симметричной, либо строго антисимметричной, ясно, что симметричные состояния во внешнем поле могут быть сформированы только из симметричных состояний (соответствующих, например, нулевому полю), а антисимметричные – только из антисимметричных. Но поскольку антисимметричное состояние всего лишь одно, оно и остается неизменным, сохраняя при изменении внешнего поля и свою энергию.

Перейдем теперь к рассмотрению временной эволюции волнового пакета, представляющего собой суперпозицию трех состояний (5) с некоторыми постоянными коэффициентами разложения $\rho_j \exp \{i\varphi_j\}$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \sum_{j=0}^2 \rho_j \Psi_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp \left\{ -i \left(\frac{\mathcal{E}_j}{\hbar} t - \varphi_j \right) \right\}. \quad (6)$$

Числа ρ_j^2 задают вероятность заселения j -го уровня.

С помощью волновой функции (6) определим количество заряда в каждой квантовой точке в зависимости от времени. Для определенности считаем заряд в левой точке $Q_L(t)$, который найдем как интеграл от одночастичной плотности распределения по области $z < 0$, домноженный на $-2e$.

Используя выражения для волновых функций (5), приходим к следующему выражению для заряда:

$$Q_L(t) = -e \{ 1 + \rho_0^2 \cos^2 \alpha + \rho_2^2 \sin^2 \alpha - \rho_0 \rho_2 \sin 2\alpha \cos (\nu t + \varphi_0 - \varphi_2) \}. \quad (7)$$

Как видно из (7), заряд совершает периодические осцилляции между двумя квантовыми точками с частотой ν , совпадающей с частотой перехода из основного состояния во второе возбужденное ($0 \rightarrow 2$):

$$\nu = \frac{\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_0}{\hbar} = \frac{2}{\hbar} \sqrt{(W - V)^2 + \Delta^2/2}, \quad (8)$$

и амплитудой

$$Q = e \rho_0 \rho_2 \sin 2\alpha, \quad (9)$$

которая, так же как и частота, зависит от внешнего электрического поля.

В соответствие с (7) и (8), осцилляции заряда в двойной квантовой точке – чисто гармонические. При этом первое возбужденное состояние практически не вносит вклада в колебания заряда, и частоты квантовых переходов $0 \rightarrow 1$ и $1 \rightarrow 2$ никак не проявляются. Влияние первого возбужденного состояния сказывается лишь на величине ρ_0 и ρ_2 , поскольку в соответствии с условием нормировки $\rho_0^2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 = 1$.

Причина этого также заключается в разной симметрии волновых функций первого возбужденного и всех остальных состояний по отношению к перестановкам частиц. В условиях, когда оператор взаимодействия строго симметричен, симметрия волновой функции не может быть изменена под действием данного возмущения и, следовательно, состояния с разной симметрией невозможно связать между собой посредством симметричного воздействия. Наличие же частот переходов $0 \rightarrow 1$ или $1 \rightarrow 2$ при колебаниях заряда как раз означало бы, что на этих частотах возможно испускание или поглощение квантов энергии, что привело бы к переходам системы из симметричных состояний в антисимметричное и наоборот.

Что касается амплитуды осцилляций заряда (9), то она определяется начальными заселенностями основного и второго возбужденного стационарных состояний, а также параметрами системы и, как уже говорилось выше, величиной напряженности внешнего электрического поля.

Очевидно, что наиболее благоприятной для возникновения колебаний электронной плотности между квантовыми точками будет ситуация, когда заселенности нулевого и второго уровней будут равными при нулевой заселенности первого уровня. В этом случае произведение $\rho_0\rho_2$ максимально и равно 0.5.

Зависимость амплитуды осцилляций от отношения матричных элементов W/V , то есть фактически от величины внешнего электрического поля, при $\rho_0 = \rho_2 = 1/\sqrt{2}$ показана на рис.2. Видно, что она имеет характерную резонансную структуру лоренцевского типа. Наибольшее значение амплитуды осцилляций достигается непосредственно в точке антикроссинга $W = V$ и составляет $e/2$ – половину электронного заряда (напротив, частота осцилляций в точке антикроссинга оказывается минимальной и равной $\Delta\sqrt{2}/\hbar$). Следовательно, полный заряд в левой квантовой точке будет периодически изменяться на один заряд электрона в пределах от $-e$ до $-2e$.

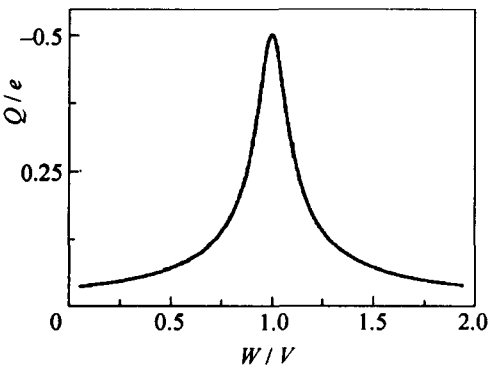


Рис.2. Амплитуда осцилляций заряда (в единицах заряда электрона e) при $\Delta/V = 0.1$ и $\rho_0 = \rho_2 = 1/\sqrt{2}, \rho_1 = 0$

Характерная ширина резонансного пика определяется энергией расщепления уровней Δ , и поскольку, как уже говорилось ранее, $\Delta \ll V$, на оси W/V этот пик оказывается достаточно узким. Выход по величине W за пределы интервала

$|W - V| \sim \Delta$ ведет к резкому уменьшению амплитуды осцилляций, а в области $|W - V| \gg \Delta$, колебания заряда уже практически полностью отсутствуют. В результате устанавливается статическое распределение заряда по квантовым точкам, такое, что в левой точке оказывается сосредоточенным заряд $-3e/2$, а в правой $-e/2$.

Выясним особую роль точки антикроссинга $W = V$. Для этого в (7) положим $\rho_2 = 0$, а $\rho_0 = 1$ и проследим за изменением заряда в левой точке в зависимости от W . Если электрическое поле не слишком сильное: $W < V$, и $|W - V| \gg \Delta$, угол α близок к $\pi/2$ и, следовательно, электроны находятся в разных квантовых точках. При переходе через точку антикроссинга ($W > V$) и удалении от нее ($|W - V| \gg \gg \Delta$), в соответствии с (7), оба заряда переходят в левую квантовую точку и далее там остаются (для второго возбужденного состояния, если положить в (7) $\rho_2 = 1$, а $\rho_0 = 0$, происходит обратный переход). Следовательно, значение W , равное V , соответствует тому значению электрического поля, которое "снимает" кулоновскую блокаду туннелирования электронов из одной квантовой точки в другую.

Таким образом, в основном состоянии при $W < V$ электрическое поле "запирает" электроны по разным квантовым точкам, а во втором возбужденном состоянии – в левой квантовой точке. При $W > V$ ситуация меняется на противоположную. И лишь в узкой области значений электрического поля, соответствующей неравенству $|W - V| \ll \Delta$, происходит как бы взаимная компенсация кулоновского взаимодействия и внешнего электростатического воздействия, что приводит к свободным колебаниям электронной плотности в двойной квантовой точке.

Оценки показывают, что значение напряженности внешнего электрического поля, необходимые для выполнения равенства $W = V$, составляет примерно 10^5 В/см, а ширина переходной области, в которой возникают осцилляции заряда, на порядок меньше.

-
1. J.Q.You and H.-Z.Zheng, Phys. Rev. **B60**, 8727 (1999).
 2. S.Nagaraja, J.-P.Leburton, and R.M.Martin, Phys. Rev. **B60**, 8759 (1999).
 3. H.Imamura, P.A.Maksym, and H.Aoki, Phys. Rev. **B59**, 5817 (1999).
 4. G.W.Bryant, Phys. Rev. **B48**, 8024 (1993).
 5. N.Tsukada, M.Gotoda, and M.Nunoshita, Phys. Rev. **B50**, 5764 (1994).
 6. N.Tsukada, M.Gotoda, M.Nunoshita, and T.Nishino, Phys. Rev. **B52**, 17005 (1995).
 7. C.-K.Wang, I.Yakymenko, I.V.Zozoulenko, and K.-F.Berggren, Phys. Rev. **B57**, 2632 (1998).
 8. R.H.Blick, D.W.van der Weide, R.J.Hang, and K.Eberl, Phys. Rev. Lett. **81**, 689 (1998).
 9. Q.Ye, R.Tsu, and E.H.Nicolian, Phys. Rev. **B44**, 1806 (1991).
 10. A.D.Andreev and A.A.Lipovskii, Phys. Rev. **59**, 15402 (1999).
 11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1989.