ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. ФИЗИКА, ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ, 2022, том 505, с. 25–28

ФИЗИКА

УДК 538.9; 537.874

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ФУНКЦИИ ГРИНА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ И КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ СПЕКТР КОМПЛЕКСНОЙ ЭНЕРГИИ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

© 2022 г. А. М. Мандель[1,*], В. Б. Ошурко[1,2,], С. М. Першин[2,***], Е. Е. Карпова[1]**

Представлено академиком РАН А.С. Бугаевым 12.04.2022 г.
Поступило 15.04.2022 г.
После доработки 15.04.2022 г.
Принято к публикации 08.06.2022 г.

Показано, что пространственная регуляризация функции Грина (фактически введение конечного радиуса источника) в электрическом поле позволяет по-новому решить задачу расчета спектра слабосвязанных состояний в квантовых точках. Обоснован физический смысл точек стационарной фазы в функции Грина, в результате чего расчет штарковского сдвига и вероятности ионизации становится полностью квазиклассическим. Получено новое правило квантования для параметров квантовых точек, при которых в них существуют слабосвязанные состояния, хорошо управляемые внешними полями.

Ключевые слова: функция Грина в электрическом поле, конечный радиус источника, квазиклассический штарковский сдвиг, правило квантования для параметров квантовых точек

DOI: 10.31857/S2686740022040083

Для квантовой электроники особую роль играют состояния с небольшой энергией связи (слабосвязанные), так как именно они хорошо управляются внешними электромагнитными полями не слишком большой напряженности, достижимыми в лабораторных условиях. К проблеме ионизации[1)] (вырывания электрона из потенциальной ямы) таких состояний хорошо развиты два альтернативных подхода. Первый состоит в том, что потенциальная яма считается бесконечно глубокой и бесконечно малой геометрически (приближение δ-потенциала, например, [1, 2]), а электрическое поле учитывается точно. Во втором подходе, напротив, точно учитываются граничные условия, формирующие структуру волновой функции связанного электрона, а электрическое поле рассматривается в рамках теории возмущений (например, [3]).

[1)] В данном контексте не столь важно, идет ли речь о фотоионизации или об автоионизации; полученные результаты применимы в обоих случаях.

[1] *Московский государственный технологический университет "СТАНКИН", Москва, Россия*
[2] *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия*
**E-mail: arkadimandel@mail.ru*
***E-mail: vbo08@yandex.ru*
****E-mail: pershin@kapella.gpi.ru*

В работе [4] предложен метод, позволяющий учесть как конечную глубину и размер потенциальной ямы, так и внешнее электрическое поле вне рамок теории возмущений. Это позволило, в частности, обнаружить новый эффект осцилляций штарковского сдвига и вероятности ионизации (ширины уровня) с изменением напряженности поля. Такие осцилляции существуют только в яме конечной глубины, и дает их одна из точек стационарной фазы в функции Грина внутри потенциальной ямы. В пределе δ-потенциала эта точка исчезает как существенно особая, так что указанный эффект принципиально непертурбативен.

В данной работе мы приблизим постановку задачи к случаю δ-потенциала, считая яму "бесконечно глубокой", но геометрически конечной (с радиусом R). Точнее, будем везде пренебрегать степенями $\mathrm{Re}(W)/U_0$; здесь W – энергия связи электрона в потенциальной яме (в электрическом поле – комплексная), U_0 – глубина ямы[2)]. Основной результат такого приближения – полное прояснение квазиклассического смысла штарковского сдвига и вероятности ионизации и парамет-

[2)] Для квантовой точки это – перепад уровня дна зоны проводимости матрицы и материала точки. Отстроиться от экситонных эффектов можно, рассматривая гетероструктуру ковариантного типа, где и дно зоны проводимости, и потолок валентной зоны в точке ниже, чем в матрице.

ров, их формирующих. Кроме того, мы получим новое, насколько нам известно, правило квантования для размеров сферических квантовых точек, определяющее условие существования в них слабосвязанных состояний, столь важных для электроники.

Удерживающий потенциал квантовой точки берем в виде прямоугольной потенциальной ямы радиуса R и глубины U_0. В качестве решения вне ямы $r > R$ можно использовать функцию Грина в электрическом поле [4–6], описывающую локализованный в яме S-электрон[3)]

$$G^{ex}(\mathbf{r},0) \sim \int_0^{\infty} dt \cdot t^{-\frac{3}{2}} \cdot \exp(\varphi), \qquad (1)$$

$$\varphi = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{m^* r^2}{2t} - \frac{1}{2} eEzt + Wt - \frac{(eE)^2 t^3}{24m^*}\right), \qquad (2)$$

где t – время, $\mathbf{r}$ – радиус-вектор (центр квантовой точки в начале координат), m^* – эффективная масса электрона в материале матрицы, E – напряженность электрического поля, направленная по оси z, W – комплексная энергия электрона с $\mathrm{Re}(W) < 0$ для связанного состояния.

Отметим сразу, что слагаемое $eEzt/2$ в экспоненте (2), нарушающее сферическую симметрию задачи, при расчете спектра можно опустить. Дело в том, что на границе ямы $r = R$, где условие сшивки логарифмической производной и формирует спектр [7], это слагаемое дает лишь малые поправки, причем как в слабых, так и в сильных полях. Подробно это аргументировано в [4, 8]. Здесь мы добавим еще один аргумент, возможно, самый важный. В базовой работе [6] вероятность ионизации получена как вероятность туннелирования частицы через треугольный потенциальный барьер, создаваемый в электрическом поле именно членом $eEzt/2$ в (2). Мы получим тот же результат, вообще убрав этот член из функции Грина. Ясно, что такая устойчивость не может быть случайной.

Для дальнейшего важно коротко описать физический смысл функции Грина (1), хотя он хорошо известен [5]. Интеграл (1) легко переписать в пределах от $-\infty$ до 0. Это означает, что вклад в амплитуду перехода частицы из источника (точки $\mathbf{r} = 0$) в точку $\mathbf{r}$ дают все предшествующие моменты времени. Основную квазиклассическую картину формируют моменты, соответствующие точкам стационарной фазы $d\varphi/dt = 0$. Их, как нетрудно убедиться, две:

$$t_0^{(1,2)} = -\frac{\sqrt{2}i\hbar}{(-2W)\beta}\left[1 \mp (1-\alpha^2)^{1/2}\right]^{1/2},$$
$$\alpha = \frac{eEr}{-2W}, \quad \beta = \frac{eE\hbar}{\sqrt{-2m^*W}(-2W)}. \qquad (3)$$

Выбор знака корней здесь диктуется исключительно принципом причинности: стационарные точки должны лежать в нижней комплексной полуплоскости [9].

Как уже отмечалось, спектр частицы определяется условием сшивки “внутренней” и “внешней” волновой функции на границе квантовой точки $r = R$. Видим, что квазиклассическое приближение определяется двумя безразмерными параметрами α и β. Их физический смысл совершенно ясен – это отношение работы поля на длине потенциальной ямы (α) или на “дебройлевской длине” (β) к удвоенной энергии связи уровня. Поясним, о какой дебройлевской длине здесь идет речь. Импульс частицы внутри ямы, разумеется, равен $\sqrt{2m^*(U_0 + W)}$. Входящий в β импульс $\sqrt{-2m^*W}$ – это импульс свободной частицы на так называемом виртуальном уровне [8]. Именно интерференция с ним, как будет видно далее, и определяет вероятность ионизации. Ясно, что в приближении δ-потенциала параметр α вообще не возникает. “Слабосвязанность” состояния означает, кроме очевидного соотношения $\mathrm{Re}(-W) \ll U_0$, и условие $\alpha \ll \beta$ в окрестности границы ямы. Частица, хоть и локализованная на квантовой точке, большую часть времени проводит в матрице, что и делает ее такой управляемой. Именно по этой причине мы не будем вводить поправки на изменение эффективной массы внутри материала квантовой точки. Тем не менее способ последовательного введения таких поправок описан в работе [10].

Теперь становится ясен физический смысл точек стационарной фазы, создающих квазиклассическую картину. Вначале рассмотрим практически более важный случай слабого электрического поля $\alpha \ll 1$. Важно, что слабость поля в данном контексте вовсе не означает малость абсолютного значения его напряженности. Любое поле будет в этом смысле сильным при $W \to 0$.

Первая точка в (3) в самом простом приближении

$$t_0^{(1)} \approx R\sqrt{-m^*/2W} + O(E^2) \approx R/v + O(E^2),$$

где v – скорость частицы на виртуальном уровне с энергией $(-W)$. Ясно, что это время вылета частицы на виртуальном уровне из центра потенциальной ямы, и внешнее поле здесь дает малые поправки. Этот корень как точка стационарной фазы вообще не существует в пределе δ-потенциала, но он и определяет действительный штарковский

[3)] Ясно, что электроны с ненулевым орбитальным моментом l локализуются ямой гораздо хуже из-за поведения решения в нуле типа $\psi(r) \sim r^{l+1}$.

сдвиг уровня в нашей картине. Вторая точка в (3) в таком же “минимальном” приближении

$$t_0^{(2)} \approx 2\sqrt{-2m^*W}/eE + O(R^2).$$

Это момент времени, когда импульс кулоновской силы eE вдвое превысит начальный импульс частицы на виртуальном уровне. Классическая аналогия – частица вылетает из ямы против поля и отражается от потенциального барьера, созданного полем. Здесь размер ямы дает малые поправки, так что данный корень выживает в пределе δ-потенциала и определяет мнимую часть энергии (вероятность ионизации).

Для полноты картины рассмотрим и случай очень сильного электрического поля $\alpha \gg 1$ (предельно слабосвязанного состояния). Два корня в том же простейшем приближении практически сливаются

$$t_0^{(3)} \approx \exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)\sqrt{\frac{2m^*R}{eE}}\left(1 \pm \frac{i}{2\alpha}\right),$$

различаясь лишь малыми поправками $\sim 1/\alpha \sim W$. И здесь физический смысл легко просматривается – это время равноускоренного движения (с ускорением eE/m^*) от центра к краю ямы. Ясно, что начальный “запас энергии” частицы $\mathrm{Re}(-W)$ дает лишь малые поправки в этом пределе.

Таким образом, квазиклассический смысл точек стационарной фазы вполне понятен. Полная перевальная оценка функции Грина во внешней окрестности квантовой точки $r > R$ имеет вид [4] (не нужные нам для построения спектра постоянные мы, как и ранее, опускаем)

$$G^{ex}(r,0) \sim \frac{eE}{(-2W)}(1-\alpha^2)^{-1/4} \times$$
$$\times\left[\frac{\exp(\varphi_3)}{((1-\alpha^2)^{1/2}-1+\alpha^2)^{1/2}} - \frac{i\exp(\varphi_4)}{((1-\alpha^2)^{1/2}+1-\alpha^2)^{1/2}}\right], \quad (4)$$

$$\varphi_{3,4} = -\frac{\sqrt{2}}{3\beta}\frac{1 \mp (1-\alpha^2)^{1/2}+\alpha^2}{[1 \mp (1-\alpha^2)^{1/2}]^{1/2}}.$$

Далее мы следуем логике базовой работы [6]: поскольку внутри ямы внешнее поле изменить волновую функцию не может, а сшивать на границе ямы $r = R$ придется именно с этой внутренней функцией, то вместо стандартного условия непрерывности логарифмической производной на границе ямы мы можем использовать для определения спектра равенство выражения (4) его же “бесполевому” пределу $E \to 0$

$$G^{ex}(R,0,\alpha,\beta) = G^{ex}(R,0,\alpha=0,\beta=0). \quad (5)$$

Так мы получаем аналог известного трансцендентного уравнения комплексной энергии из метода δ-потенциала ([1, 6] и т.д.) для ямы конечных размеров

$$\exp\left[-\frac{R}{\hbar}\sqrt{-2m^*W_0}\right] = \frac{\alpha}{\sqrt{2}(1-\alpha^2)^{1/4}} \times$$
$$\times\left[\frac{\exp(\varphi_3)}{((1-\alpha^2)^{1/2}-1+\alpha^2)^{1/2}} - \frac{i\exp(\varphi_4)}{((1-\alpha^2)^{1/2}+1-\alpha^2)^{1/2}}\right], \quad (6)$$

где W_0 – не возмущенное полем значение энергии уровня.

В слабом поле, с точностью до членов $\sim\alpha^2$, из (6) получаем комплексное значение уровня энергии во внешнем электрическом поле

$$W = W_0\left(1 + \frac{\alpha\beta}{2} - i\beta\cdot\frac{\exp\left(-\frac{2}{3\beta}\right)}{2}\right). \quad (7)$$

Мнимая часть энергии (ширина уровня) в точности совпадает с результатами [1, 6] и многих других авторов. Это, несомненно, подтверждает возможность упрощения функции Грина (2), описанного ранее. А вот квазиклассическое выражение для штарковского сдвига отличается довольно значительно. В модели δ-потенциала соответствующее выражение имеет вид $\beta^2/4$ в наших обозначениях [6]. По абсолютному значению наше выражение гораздо меньше ввиду $\alpha \ll \beta$ для слабосвязанных состояний.

Предлагаемая пространственная регуляризация функции Грина состоит в том, что мы не будем устремлять $R \to 0$, т.е. распространять область определения (1), (2) на все пространство, кроме точки $R = 0$. Определим функцию Грина внутри потенциальной ямы $r < R$ в виде

$$G^{in}(\mathbf{r},0) \sim \int_0^\infty dt\cdot t^{-\frac{3}{2}}\cdot[\exp(i\varphi') - i\exp(i\varphi')], \quad (8)$$

$$\varphi' = \frac{i}{\hbar}\left(\frac{m^*r^2}{2t} + (U_0+W)t - \frac{(eE)^2t^3}{24m^*}\right). \quad (9)$$

Такая комбинация – единственный вариант сделать конечной в нуле величину

$$\mathrm{Re}[G^{in}(\mathbf{r},0)]/r$$

(подробности – в [7]). В (9) мы уже исключили нарушающее сферическую симметрию слагаемое, как и в (2). Далее повторяем все предыдущие оценки для функции (8), пренебрегая везде степенями $\mathrm{Re}(W)/U_0$. Тогда условие сшивки на границе ямы, аналогичное (5), приводит к уравнению, дополняющему (6):

$$\sqrt{U_0}\cdot\mathrm{ctg}(R\sqrt{2m^*U_0}/\hbar) = -\sqrt{-W_0}. \quad (10)$$

Но ввиду $-W_0 \ll U_0$, радиус квантовой точки должен удовлетворять дополнительному условию квантования

$$R\sqrt{2m^* U_0} \approx \pi\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar. \quad (11)$$

Только в этом случае на точке может локализоваться слабосвязанный электрон.

В заключение остановимся на естественном вопросе – насколько “модельно зависимы” наши результаты. Мы рассмотрели один из простейших видов удерживающего потенциала – прямоугольную яму. Однако, на наш взгляд, спектральные соотношения типа (6), (10) и условие типа (11) должны иметь место в любом реалистическом короткодействующем потенциале, исключающем конфаймент для электронов[4)]. В любом случае придется сшивать растущую из нуля степенную функцию с убывающей экспонентой вне области потенциала. Пройти через максимум (возможно, не первый) волновая функция должна вблизи границы ямы для слабосвязанного состояния. Именно этими обстоятельствами порождены указанные условия, хотя конкретная их форма, разумеется, может значительно меняться с изменением формы удерживающего потенциала.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России, грант FSFS-2020-0025.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Демков Ю.Н., Островский В.Н.* Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд. ЛГУ, 1975.
2. *Эминов П.А., Гордеева С.В.* Ионизация квантовой точки электрическими полями. // Квантовая электроника. 2012. Т. 42. № 8. С. 733–739. https://doi.org/10.1070/QE2012v042n08ABEH014873
3. *Зегря Г.Г., Самосват Д.М.* Энергетический спектр и время жизни носителей заряда в открытых квантовых точках в электрическом поле // ЖЭТФ. 2009. Т. 135. № 6. С. 1043–1055. https://doi.org/10.31857/S1234567820240040
4. *Мандель А.М., Ошурко В.Б.* Энергетический спектр идеальных квантовых точек, управляемых внешним электрическим полем // Квантовая электроника. 2018. Т. 48. № 1. С. 49–56. https://doi.org/10.1070/QEL16474
5. *Feyntman R.P., Hibbs A.R.* Quantum mechanics and part integrals. N.Y.: McGray-Hill book company, 1965.
6. *Демков Ю.Н., Друкарев Г.Ф.* Распад и поляризуемость отрицательного иона в электрическом поле // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. № 3 (9). С. 918–924.
7. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.
8. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Першин С.М.* Тонкое полупроводниковое квантовое кольцо – аналог атома Бора, управляемого магнитным полем // Доклады РАН. Физика, технические науки. 2021. Т. 500. С. 21–25. https://doi.org/10.31857/S2686740021050047
9. *Нуссинцвейг Х.М.* Причинность и дисперсионные соотношения. М.: Мир, 1976.
10. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Карпова Е.Е.* Механизм перенормировки фактора Ланде и эффективной массы в малых сферических квантовых точках // Радиотехника и электроника. 2019. Т. 64. № 10. С. 1010–1018. https://doi.org/10.1134/S1064226919100085

[4)]Весьма распространенный случай потенциала с так называемым “кулоновским хвостом” подробно описан в [7] и не очень отличается от нашего.

SPATIAL REGULARIZATION OF THE GREEN’S FUNCTION IN AN ELECTRIC FIELD AND THE QUASI-CLASSICAL COMPLEX ENERGY SPECTRUM IN QUANTUM DOTS

A. M. Mandel[a], V. B. Oshurko[a,b], S. M. Pershin[b], and E. E. Karpova[a]

[a]*MSTU “STANKIN”, Moscow, Russia*

[b]*Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Presented by Academician of the RAS A.S. Bugaev

It is shown that the spatial regularization of the Green’s function (in fact, the introduction of a finite source radius) in an electric field makes it possible to solve the problem of calculating the spectrum of weakly bound states in quantum dots in a new way. The physical meaning of the stationary phase points in the Green’s function is clarified, so that the calculation of the Stark shift and the ionization probability becomes completely semiclassical. A new quantization rule is obtained for the parameters of quantum dots, under which there are weakly bound states in them, well controlled by external fields.

Keywords: Green’s function in an electric field, finite source radius, semiclassical Stark shift, quantization rule for quantum dot parameters