

Энергетический спектр идеальных квантовых точек, управляемых внешним электрическим полем

А.М.Мандель, В.Б.Ошурко

Построена теоретическая модель, описывающая энергетический спектр и вероятность автоионизации идеальной трехмерной квантовой точки во внешнем постоянном и переменном электрических полях, не использующая приближений дельта-потенциала и теории возмущений. Рассчитаны волновые функции квазистационарных состояний электронов в таких условиях. Для этого создан новый метод регуляризации гамовской волновой функции и на его основе рассчитана комплексная энергия электрона, описывающая как энергетический спектр системы, так и вероятность распада состояния (автоионизацию). Обнаружен эффект осцилляций штарковского сдвига и ширины уровня в постоянном электрическом поле. Установлено, что такие осцилляции существенно влияют на энергетический спектр точки и принципиально не могут быть рассчитаны в рамках пертурбативных подходов.

Ключевые слова: идеальные квантовые точки, внешнее электрическое поле, регуляризация гамовской волновой функции, осцилляции сдвига Штарка и ширины уровня.

1. Введение

В настоящее время существует заметный интерес к вопросам взаимодействия интенсивных электромагнитных полей, в частности лазерных, с различными наноструктурами [1-6]. Это связано с перспективами создания и применения различных типов наноструктур, что привело к появлению большого числа экспериментальных и теоретических работ по взаимодействию интенсивных электромагнитных полей с нанообъектами. В частности, представляет интерес известная задача теоретического описания процесса ионизации квантовой точки интенсивными электромагнитными полями. Ниже речь пойдет, в основном, о постоянном электрическом поле, но будет рассмотрено и влияние переменной составляющей.

Подобная задача решалась, например, в работах [3–5]. Ближе всего по постановке задачи работа [3], где были получены явные аналитические выражения для вероятности ионизации двумерной квантовой точки в постоянном и переменном электрических полях без использования теории возмущений. Для описания квантовой точки конечного размера использовался двумерный квадратичный потенциал. Однако основной результат получен на базе функции Грина, являющейся решением уравнения Шредингера только во внешней области квантовой точки, которое, как хорошо известно, принципиально использует приближение потенциала в виде дельта-функции Дирака. В итоге авторы [3], по сути, не смогли учесть влияние конечных размеров точки и воспроизвели из-

вестные результаты для вероятности ионизации в притягивающем дельта-потенциале. Это, безусловно, ограничивает применимость данной модели для описания реальных экспериментальных результатов.

При описании потенциальной ямы конечных размеров во внешнем электрическом поле мы сталкиваемся с двумя серьезными проблемами. Во-первых, в уравнении Шредингера осевая симметрия, навязываемая системе электрическим полем, «конфликтует» с симметрией граничных условий, обусловленных формой квантовой точки (в нашем случае – сферической). В результате аналитическое решение выражается в виде двойного ряда специальных функций (например, в работе [7]). Искать собственные значения для таких решений чрезвычайно сложно. Во-вторых, остается достаточно старой и до сих пор не вполне разрешенная проблема регуляризации так называемой гамовской волновой функции [8, 9].

Эта проблема впервые была поставлена и активно изучалась в теории α -распада [8]. Строго говоря, здесь волновая функция не является решением стационарного уравнения Шредингера из-за конечного времени жизни состояния, тем не менее стационарное уравнение все же можно использовать, если вероятность распада состояния мала. Для этого в собственные значения гамильтониана нужно ввести мнимую добавку, пропорциональную вероятности распада. Однако нормировочные интегралы и целый ряд других физически значимых выражений, содержащих пространственные интегралы от волновой функции, как и следовало ожидать для «разлетающейся» системы, расходятся [10]. Это значительно усложняет работу с квазистационарными состояниями и часто порождает сомнения в правильности полученных результатов. В постоянном внешнем электрическом поле ситуация еще сложнее. Здесь сама гамовская волновая функция выражается в виде экспоненциально расходящегося интеграла (см., напр., [11]).

Нам известны только два варианта решения этой проблемы, и оба сформулированы лишь в приближении притягивающего дельта-потенциала. Первый [12] основан на

А.М.Мандель, Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127055 Москва, Вадковский пер., 3а; e-mail: arkadimandel@mail.ru

В.Б.Ошурко, Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127055 Москва, Вадковский пер., 3а; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, 115409 Москва, Каширское ш., 31

Поступила в редакцию 13 июля 2017 г., после доработки – 1 ноября 2017 г.

преобразовании однократного (и без того достаточно сложного) интеграла, через который выражается функция Грина в электрическом поле, в двукратный. Мы не смогли повторить расчеты авторов, о чем подробно шла речь в работе [13]. Во втором варианте [14] используется идея Зельдовича [9] о введении под знак интеграла регуляризирующего сомножителя вида $\exp(-\alpha r^2)$, $\alpha \rightarrow 0$, r – радиальная переменная сферической системы. Ясно, что этот метод очевидно проще первого. Но, как отмечают сами авторы, область его применимости ограничивается ситуацией, когда реальная часть энергии больше мнимой. Кроме того, здесь подынтегральное выражение усложняется с не вполне очевидными последствиями, что требует, на наш взгляд, независимого способа проверки.

Сочетание двух вышеуказанных проблем делает задачу описания квантовой точки (т.е. потенциальной ямы конечных размеров и глубины) во внешнем электрическом поле весьма трудноразрешимой*. Сейчас наметились два подхода к ее решению. В первом (см. напр., [5]) точно учитываются граничные условия, формирующие сферически-симметричную структуру решения, но электрическое поле рассматривается в рамках теории возмущений, что позволяет обойти проблему расходимости гаммовской функции. Однако расчеты в таком подходе чрезвычайно громоздки и трудновоспроизводимы, так что физическую картину и границы применимости модели оценить сложно. Для упрощения ситуации авторы вынуждены были брать эффективные массы электрона в различных материалах одинаковыми, что, безусловно, обеднило модель**. В итоге все свелось к приближению обычной «туннельной экспоненты» для ширины уровня (формулы (16) и (20) из [5]), в котором электрическое поле учтено только в рамках теории возмущений. Тем не менее в работе обнаружен неожиданный для такого рода задач эффект – знак поправки к ширине уровня в электрическом поле может меняться в зависимости от энергии связи. Этот результат, на наш взгляд, имеет то же происхождение, что и обнаруженные нами осцилляции ширины уровня в постоянном электрическом поле.

Второй подход к описанию квантовых точек в электрическом поле в некотором смысле обратен первому. Здесь влияние электрического поля учитывается точно, а квантовая точка моделируется дельта-ямой. Пример такого подхода – уже упоминавшаяся работа [3]. Сравнение ее результатов с нашими особенно показательное, т.к. мы используем аналогичное представление для притягивающего потенциала точки и аналогичное условие непрерывности логарифмической производной на сферической границе точки для определения энергии уровня. Различие в геометрии задач (в [3] рассматривается ионизация из двумерных точек) абсолютно несущественно для выяснения физического смысла данной модели. Главное в том, что в качестве решения авторы используют функцию Грина, являющуюся решением уравнения только во внешней области квантовой точки (формулы (7), (9) из [3]). Происхождение этого решения видно и из характера приведенной там ссылки. Более того, проводя перевальную оценку полученного интеграла, авторы [3] использу-

ют вклад лишь одной точки перевала, что также характерно для приближения дельта-потенциала. Если не устремлять к нулю радиус потенциальной ямы, точек перевала должно быть две (см. формулу (7) настоящей работы). Одна из них, сохраняющаяся в приближении дельта-ямы, дает основной вклад в ширину уровня, а вторая, исчезающая в этом приближении, определяет ее осцилляции. Таким образом, задача для ямы конечных размеров авторами [3], по нашему мнению, лишь декларируется. Неудивительно поэтому, что итоговый результат для вероятности ионизации (ширины уровня) в постоянном электрическом поле (формула (29) из [3]) воспроизводит давно и хорошо известный результат для дельта-ямы [11] – с поправкой на геометрию задачи.

В настоящей работе построена модель, сочетающая преимущества двух вышеуказанных подходов. Мы описываем идеальные квантовые точки – нульмерные полупроводниковые гетероструктуры, потенциальные ямы которых «вмещают» только один связанный уровень энергии [15]. Чтобы избежать локализации дырок в таких ямах с последующим образованием экситона, энергетическая структура точки относительно матрицы должна быть «ковариантной» [16], т.е. как дно зоны проводимости, так и потолок валентной зоны должны быть ниже, чем в матрице.

С практической точки зрения простой спектр идеальных квантовых точек, а также чувствительность спектра к влиянию внешних магнитного и электрического полей создают базу для многочисленных приложений в нанoeлектронике, спинтронике, лазерной физике и т.д. Целый ряд характеристик идеальных трехмерных сферических квантовых точек в магнитном поле рассчитывался в наших работах [17–20]. Цель настоящей работы – предложить более корректное теоретическое описание идеальной квантовой точки во внешних постоянном и переменном электрических полях. Для этого построен простой для расчетов и не имеющий ограничений по отношению действительной и мнимой частей энергии метод регуляризации волновой функции, основанный на введении в напряженность поля малой отрицательной мнимой добавки. На его основе рассчитана комплексная энергия электрона, локализованного в идеальной квантовой точке. Одно из следствий полученного решения – не описанный ранее, насколько нам известно, эффект осцилляций штарковского сдвига и ширины уровня в постоянном электрическом поле. Тем самым исследуются возможности электрического поля как фактора, управляющего энергетическим спектром идеальной квантовой точки.

2. Волновая функция связанного электрона в электрическом поле

Рассмотрим в качестве потенциальной ямы полупроводниковую гетероструктуру типа сферической квантовой точки радиусом R во внешней матрице. Притягивающий потенциал (аналогично [17] и другим работам) задается в виде

$$U(r) = \begin{cases} -|U_0|, & r < R, \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (1)$$

где глубина потенциальной ямы $|U_0|$ – разность энергий дна зон проводимости материала окружающей матрицы и точки; r – радиальная координата сферической системы.

* Ситуация с магнитным полем в этом смысле проще, т.к. состояние электрона в нем остается стационарным. Поэтому приходится решать только проблему «конфликта» двух типов симметрии.

** Авторы [5] рассматривают открытую квантовую точку типа ядро–оболочка, из которой туннелирование электронов возможно и без внешнего поля; см. также похожую работу [6].

При $r > R$ уравнение Шредингера при наличии электрического поля имеет стандартный вид,

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}^*} \Delta \psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}) + (W - eEz) \psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (2)$$

причем реальная часть комплексной энергии $\text{Re}(W) < 0$, т. к. это – энергия связи уровня. Остальные обозначения: m_{ex}^* – эффективная масса электрона в материале матрицы; Δ – оператор Лапласа в сферических координатах; e – модуль заряда электрона; E – модуль напряженности электрического поля, направленного по оси z . Естественно, единственное связанное состояние в яме – это s -состояние.

В качестве решения в этом случае удобно использовать функцию Грина в электрическом поле (см. напр., [11, 21, 22]). Решение этой задачи для общего случая циркулярной электромагнитной волны хорошо известно ([22], формула (5) на с. 844):

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) = & \frac{1}{4\pi} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar} \right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \\ & \times \exp \frac{i}{\hbar} \left[Wt + \frac{mr^2}{2t} + \frac{eEy}{\omega} \left(\frac{\sin(\omega t)}{\omega t} - 1 \right) \right. \\ & \left. - \frac{2eEz}{\omega^2 t} \sin^2 \frac{\omega t}{2} - \frac{e^2 E^2}{2m\omega^2} \left(t - \frac{4}{\omega^2 t} \sin^2 \frac{\omega t}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Здесь m – масса свободного электрона; t – время; x и y – декартовы координаты (волна распространяется вдоль оси z); ω – частота волны. Переходя в этом выражении к пределу $\omega \rightarrow 0$, получаем для постоянного электрического поля

$$\begin{aligned} \psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}) = & A \int_0^\infty \frac{dt}{t^{3/2}} \exp(i\varphi), \\ \varphi = & \frac{i}{\hbar} \left[\frac{mr^2}{2t} + \left(W - \frac{1}{2} eEz \right) t - \frac{(eE)^2}{24m} t^3 \right], \end{aligned}$$

где A – константа нормировки.

Переменную интегрирования удобно сделать безразмерной, заменив $t \rightarrow \tau |U_0|/\hbar$.

После этого получим окончательно для функции Грина в электрическом поле во внешней матрице, заменив $m \rightarrow m_{\text{ex}}^*$:

$$\psi_{\text{ex}}(\mathbf{r}) = A \int_0^\infty d\tau \tau^{-3/2} \exp(i\varphi_{\text{ex}}^0), \quad (3)$$

где

$$\varphi_{\text{ex}}^0 = \frac{m_{\text{ex}}^* |U_0| r^2}{2\hbar^2 \tau} + \frac{\tau}{|U_0|} \left[W - \frac{1}{2} eEz - \frac{(eE\hbar\tau)^2}{24m_{\text{ex}}^* |U_0|^2} \right].$$

Это решение можно существенно упростить на основании следующих соображений. Оно, как мы видим, явно осесимметрично. В то же время условие (1), определяющее форму потенциальной ямы, имеет сферическую симметрию. Таким образом, в задаче возникает своеобразный «конфликт симметрий». Внешнее поле «навязывает» системе симметрию одного типа, а форма ямы – другого. В этой ситуации получить качественно ясное аналитиче-

ское решение весьма затруднительно. Отметим, что такого рода конфликт симметрий вообще характерен для процессов во внешних полях [17–20]. Проще всего он разрешается в относительно слабых полях*. Здесь «слабым» в смысле критического влияния на ситуацию будет поле, удовлетворяющее условию

$$E \ll 2|\text{Re}(W)|/(eR). \quad (4)$$

Физический смысл этого условия довольно прост: работа поля на длине ямы не должна критически влиять на энергию связи частицы, т. е. не должна вызывать ионизацию. Иными словами, рассматривается геометрическая область по z , для которой справедливо выражение (4). Это означает, что точка $z_0 = -2|\text{Re}(W)|/(eE)$, в которой для электрона начинается доступная область обычного «надбарьерного» движения, должна быть отделена от границ ямы. При ионизации именно в эту точку электрон туннелирует из ямы за счет работы электрического поля. Состояние электрона будет квазистационарным, если потенциальный барьер между точками $z = -R$ и $z = z_0$ достаточно широк. Для расчета энергии связи нам нужна функция Грина только в окрестности потенциальной ямы. Поэтому в (3) можно опустить слагаемое $eEz/2$, сохранив, однако, следующее квадратичное по полю слагаемое. Это сразу делает ситуацию сферически-симметричной, что существенно упрощает задачу. Поясим это еще раз. Линейный член «выбрасывается» вовсе не только из-за абсолютной малости поля E , отбрасывают его в силу неравенства (4), и это вовсе не означает, что следующий квадратичный по полю член слабо влияет на ситуацию.

Как отмечалось выше, интеграл в (3) расходится на верхнем пределе за счет отрицательной мнимой части комплексной энергии W . Наиболее простой и естественный способ подавления этой расходимости – введение в напряженность поля малой отрицательной мнимой добавки, т. е. замена $E \rightarrow E - i\alpha$, $\alpha \rightarrow 0$. После этого интеграл в (3) очевидно сходится, причем его значение довольно быстро перестает зависеть от аппроксимации верхнего предела интегрирования. Никаких ограничений сходимости по условию $\text{Re}(W) \geq \text{Im}(W)$, о которых шла речь в [14], у нас не наблюдается. Интеграл прекрасно сходится даже при $\text{Re}(W) = 0$, $\text{Im}(W) \neq 0$. Более того, дополнительную обоснованность расчетам придает тот факт, что в слабых полях интеграл (3) близок к своей перевальной оценке.

Эта оценка кардинально отличается от оценки в случае дельта-ямы. Условие $d\varphi_{\text{ex}}^0/d\tau = 0$ дает биквадратное уравнение для определения точек перевала:

$$\frac{(eE\hbar)^2}{2m_{\text{ex}}^*} \tau^4 - 4W|U_0|^2 \tau^2 + \frac{2m_{\text{ex}}^* |U_0|^4 r^2}{\hbar^2} = 0. \quad (5)$$

Оно имеет два корня в нижней полуплоскости** комплексного τ вблизи мнимой оси:

* Для связанных состояний понятия «слабого» и «сильного» полей гораздо более условны, чем для свободных. В частности, для свободного электрона в вакууме сильным является электрическое поле, способное совершить работу по рождению пары на комптоновской длине волны [7]; в полупроводнике – по рождению электронно-дырочной пары [23]. Для электрона, локализованного дельта-потенциалом, любое поле является слабым вблизи дельта-ямы и сильным вдали от нее [24].

** То, что корни лежат именно в нижней полуплоскости «собственного времени» τ , обусловлено уже принципом причинности [25].

$$\tau_0^{(1,2)} = -2i \frac{|U_0|}{eE\hbar} (-m_{\text{ex}}^* W)^{1/2} [1 \mp (1 - \beta)^{1/2}]^{1/2}, \quad (6)$$

где

$$\beta = \left(\frac{eEr}{2W} \right)^2.$$

Видим, что первый корень в пределе $E \rightarrow 0$ «выживает»,

$$\tau_0^{(1)} \xrightarrow{E \rightarrow 0} -i \frac{r|U_0|}{\hbar} \left(\frac{m_{\text{ex}}^*}{-2W} \right)^{1/2} + O(E^2),$$

причем – со степенными поправками по полю. Второй корень в этом пределе вообще не существует. Таким образом, он дает принципиально непертурбативный вклад по полю в решение (3). Напротив, в пределе $r \rightarrow 0$ «выживает» только второй корень, причем тоже с регулярными поправками по r :

$$\tau_0^{(2)} \xrightarrow{r \rightarrow 0} -i \frac{2|U_0|}{eE\hbar} (-m_{\text{ex}}^* W)^{1/2} + O(r^2). \quad (7)$$

Понятно, что только этот корень имеет аналог в приближении дельта-потенциала.

В этой модели сдвиг реальной части уровня в поле (сдвиг Штарка) обычно вычисляется в виде асимптотического ряда по степеням E^2 (см., напр., [22]). Его коэффициенты можно получить, разлагая вклад последнего слагаемого в фазовом члене (3) в окрестности точки $\tau = 0$. При этом необходимо учесть и зависимость $W(E)$. Ширина уровня в этом приближении определяется вкладом точки перевала $\tau_0^{(2)}$ в пределе (7). Ведение малого, но конечного радиуса силового центра (в нашем случае – радиуса квантовой точки) можно рассматривать как своеобразную «регуляризацию» дельта-потенциала на малых расстояниях. Легко убедиться, что это заметно улучшает аналитические свойства теории*. Понятно, что подобная регуляризация несколько противоречит логике самого метода. Основная привлекательность приближения дельта-потенциала связана как раз с простотой, обусловленной уменьшением радиуса взаимодействия до нуля [26]. Обратной стороной этой простоты является потеря связи исходных характеристик уровня со свойствами потенциальной ямы и дополнительная неаналитичность.

Сама перевальная оценка интеграла (3) принимает вид

$$\psi_{\text{ex}}(r) = \frac{A}{(2m_{\text{ex}}^* |U_0|)^{1/2}} \frac{eE\hbar}{(-2W)} \times \left\{ \frac{\exp \varphi_3}{[(1 - \beta)^{1/2} - 1 + \beta]^{1/2}} - \frac{i \exp \varphi_4}{[(1 - \beta)^{1/2} + 1 - \beta]^{1/2}} \right\}, \quad (8)$$

где

$$\varphi_{3,4} = -\frac{4}{3} \frac{(-m_{\text{ex}}^* W^3)^{1/2}}{eE\hbar} \frac{1 \mp (1 - \beta)^{1/2} + \beta}{[1 \mp (1 - \beta)^{1/2}]^{1/2}}. \quad (9)$$

Видим, что в пределе $E \rightarrow 0$ первое слагаемое дает характерную для связанных состояний убывающую с расстоянием экспоненту:

*Способность именно электрического поля улучшать аналитические свойства функций, описывающих пороговые реакции в квантовой теории поля и квантовой механике, за счет «снятия» особенностей типа точек ветвления в окрестности порога подробно анализировалась в [13].

$$\psi_{\text{ex}}(r_{\text{ex}}) \sim \exp \left[-\frac{1}{\hbar} (-2m_{\text{ex}}^* W)^{1/2} r \right] / r,$$

а второе слагаемое исчезает как существенно особая точка.

Чтобы сформулировать условие на энергию связи электрона, необходимо построить решение уравнения Шредингера в пространстве внутри квантовой точки. В наших работах [17–20] показано, как это можно сделать для магнитного поля в потенциале вида (1). В электрическом поле ситуация вполне аналогична после упрощения функции Грина при условии (4). Аналитически продолжим решение из внешней области в область $r < R$, заменяя необходимые постоянные. Учтем при этом, что волновая функция должна быть ограничена в нуле. Уравнение Шредингера внутри ямы

$$\frac{\hbar^2}{2m_{\text{in}}^*} \Delta \psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) + (|U_0| + W - eE'z) \psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (10)$$

где напряженность поля внутри сферической квантовой точки $E' = 3E/(\mathcal{E} + 2)$ [27]; m_{in}^* – эффективная масса электрона в материале точки; \mathcal{E} – относительная диэлектрическая проницаемость материала точки в матрице. Соответственно два линейно независимых упрощенных решения для этой области (B – не интересующая нас постоянная нормировки) таковы:

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = B \int_0^\infty d\tau \tau^{-3/2} \exp(\pm i\varphi_{\text{in}}^0), \quad (11)$$

где

$$\varphi_{\text{in}}^0 = \frac{m_{\text{in}}^* |U_0| r^2}{2\hbar^2 \tau} + \frac{\tau}{|U_0|} \left[|U_0| + W - \frac{(eE'\hbar\tau)^2}{24m_{\text{in}}^* |U_0|^2} \right].$$

Граничному условию в нуле, как легко убедиться, удовлетворяет следующая их комбинация:

$$\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}) = B \int_0^\infty d\tau \tau^{-3/2} [\exp(i\varphi_{\text{in}}^0) - i \exp(-i\varphi_{\text{in}}^0)]. \quad (12)$$

Далее, следуя [9], строим функцию $\chi(\mathbf{r}) = r\psi(\mathbf{r})$ и требуем непрерывности ее логарифмической производной на границе квантовой точки. В результате получаем замкнутое уравнение, позволяющее после регуляризации рассчитать энергию связанного уровня:

$$m_{\text{in}}^* \frac{\int_0^\infty d\tau \tau^{-5/2} [\exp(i\varphi_{\text{in}}^0) + i \exp(-i\varphi_{\text{in}}^0)]}{\int_0^\infty d\tau \tau^{-3/2} [\exp(i\varphi_{\text{in}}^0) - i \exp(-i\varphi_{\text{in}}^0)]} = m_{\text{ex}}^* \frac{\int_0^\infty d\tau \tau^{-5/2} \exp(i\varphi_{\text{ex}}^0)}{\int_0^\infty d\tau \tau^{-3/2} \exp(i\varphi_{\text{ex}}^0)}. \quad (13)$$

3. Комплексная энергия связанного электрона. Сдвиг Штарка и вероятность автоионизации. Отличия от модели дельта-потенциала

Два обстоятельства осложняют использование формулы (13) даже после описанной выше регуляризации. Во-первых, это сильные осцилляции интегралов в левой

части (13) при $E' \rightarrow 0$. Они обусловлены вкладом второй точки перевала в данной области (эти точки, в отличие от (6), лежат вблизи реальной оси):

$$\tau_0^{(1,2)} = 2 \frac{|U_0|}{eE\hbar} [m_{\text{in}}^* (|U_0| + W)]^{1/2} [1 \mp (1 - \gamma)^{1/2}]^{1/2}, \quad (14)$$

где

$$\gamma = \left[\frac{eE'r}{2(|U_0| + W)} \right]^2.$$

Соответственно перевальная оценка (11) имеет вид

$$\psi_{\text{in}}(r) = \frac{B}{(2m_{\text{ex}}^* |U_0|)^{1/2}} \frac{eE\hbar}{2(|U_0| + W)} \times \left\{ \frac{\exp \varphi_1}{[(1 - \beta)^{1/2} - 1 + \beta]^{1/2}} - \frac{i \exp \varphi_2}{[(1 - \beta)^{1/2} + 1 - \beta]^{1/2}} \right\}, \quad (15)$$

где

$$\varphi_{1,2} = \frac{4}{3} \frac{[m_{\text{in}}^* (|U_0| + W)^3]^{1/2}}{eE'\hbar} \frac{1 \mp (1 - \gamma)^{1/2} + \gamma}{[1 \mp (1 - \gamma)^{1/2}]^{1/2}}.$$

Как будет видно далее, упомянутые осцилляции сильно «зашумляют» общий тренд соответствующих кривых. Его целесообразно выделить, удалив вклад осцилляций. Это можно сделать как программными средствами, так и аналитически. Важно отметить, что для данной цели нельзя просто устранить вклад второй точки перевала. Заменяя все интегралы в (13) их перевальными оценками и опустив члены с $\sin \varphi_2$ и $\cos \varphi_2$, получим «сглаженное» уравнение для энергии связанного уровня:

$$m_{\text{in}}^{*1/2} \left[\frac{|U_0| + W}{-W} \frac{1 + (1 - \gamma)^{1/2}}{1 + (1 - \beta)^{1/2}} \right]^{1/2} \cot \varphi_1 = -m_{\text{ex}}^{*1/2} \left\{ 1 + i \left[\frac{1 - (1 - \beta)^{1/2}}{1 + (1 - \beta)^{1/2}} \right]^{1/2} \exp(\varphi_4 - \varphi_3) \right\}. \quad (16)$$

Все нижеследующие расчеты выполнены с помощью либо этого выражения, либо формулы (13), в которой значения интегралов заменены перевальными оценками (8) и (15).

Второе осложняющее расчеты «техническое» обстоятельство касается ограничений на величину поля (4). Если реальная часть энергии мала, даже небольшого электрического поля может быть достаточно, чтобы исчез потенциальный барьер между потенциальной ямой в квантовой точке и окружающей матрицей. Другими словами, значение β при этом может превысить единицу, что означает выход за рамки используемого приближения. Поэтому мы обрываем расчеты на величине поля, обусловленной (4).

Размер идеальной квантовой точки должен находиться в строго определенном интервале, между «нижним» и «верхним» критическими радиусами [9]. Ограничение снизу обусловлено следующим фактором. В центре потенциальной ямы электронная плотность (функция $\chi(r)$, сшиваемая на границе квантовой точки) имеет узел. Вне ямы электронная плотность s -состояния экспоненциально убывает. Следовательно, внутри ямы электронная плотность должна пройти через максимум. В связи с этим минимально возможный радиус идеальной квантовой

точки $R_{\text{min}} = \pi\hbar/[2(2m_{\text{in}}^* |U_0|)]^{1/2}$ [17, 19, 20]. Максимально возможный радиус $R_{\text{max}} = 3R_{\text{min}}$; при этом в яме появляется второй уровень (2s-состояние). Слабое внешнее поле, как легко увидеть из (16), несколько увеличивает оба радиуса, практически сохраняя соотношение между ними.

Обратим внимание на очень важное, на наш взгляд, обстоятельство. Считается, что дельта-потенциал – предел «последовательности» все более узких и глубоких ям. Если это так, то решения (8), (12) и, главное, условия для энергии уровня (13) должны в этом пределе непрерывно переходить в решение в дельта-яме. Такого перехода, однако, нет, что следует уже из существования минимального радиуса, а то обстоятельство, что $R_{\text{min}} \xrightarrow{U_0 \rightarrow \infty} 0$, ничего не меняет. Именно поэтому в методе дельта-потенциала энергия связанного уровня – произвольный внешний параметр. Аналогом условия (16) в этом методе является известное трансцендентное уравнение для комплексной энергии (см., напр., [11], [25] и т. д.). Его легко получить из (3), требуя независимости длины рассеивания от внешнего поля. Однако это уравнение не дает возможности отбирать конкретные значения энергии связи, а описывает только поведение заранее известного уровня во внешнем поле.

4. Обсуждения результатов и выводы

Теперь можно перейти к обсуждению полученных результатов. На рис.1 приведены зависимости штарковского сдвига от напряженности поля для идеальных квантовых точек разных размеров. Сама напряженность здесь и на остальных рисунках нормируется на поле

$$E_0 = (2m_{\text{in}}^*)^{1/2} |U_0|^{3/2} / (e\hbar),$$

а сдвиг реальной части уровня – на глубину потенциальной ямы $|U_0|$:

$$Sht = (\text{Re } W - W_0) / |U_0|,$$

где W_0 – энергия связи уровня в отсутствие внешнего поля, т. е. в пределе $E \rightarrow 0$. Монотонные кривые рассчитаны с помощью приближенной и «сглаженной» формулы (16), осциллирующие – точного выражения (13). Расчет проведен для следующих модельных (но вполне реалистичных) параметров: $m_{\text{in}}^* = 0.05m$, $m_{\text{ex}}^* = 0.1m$, $\mathcal{E} = 2$. Видно, что зависимость сдвига Штарка от поля гораздо сложнее и интереснее зависимости в приближении дельта-потенциала (последняя близка к монотонным кривым). Осцилляции влияют на сдвиг вполне ощутимо. Как видно из (15), эти осцилляции связаны со вкладом как раз тех точек перевала, которые исчезают в модели дельта-ямы. Вклад осцилляций тем существеннее, чем больше размер потенциальной ямы. Частота их в целом обратно пропорциональна напряженности поля, амплитуда зависит от поля сложным образом. Грубо говоря, она пропорциональна полю и обратно пропорциональна усредненной энергии связи, в свою очередь зависящей от поля. Поэтому относительное значение амплитуды осцилляций вначале растет с ростом поля, а затем начинает падать, так что в конце концов огибающие осциллирующих кривых сходятся к монотонным. Напомним, что ограничение $\beta < 1$ сужает область проведения достоверных расчетов. Отметим также, что с ростом размера ямы может измениться даже знак штарковского сдвига.

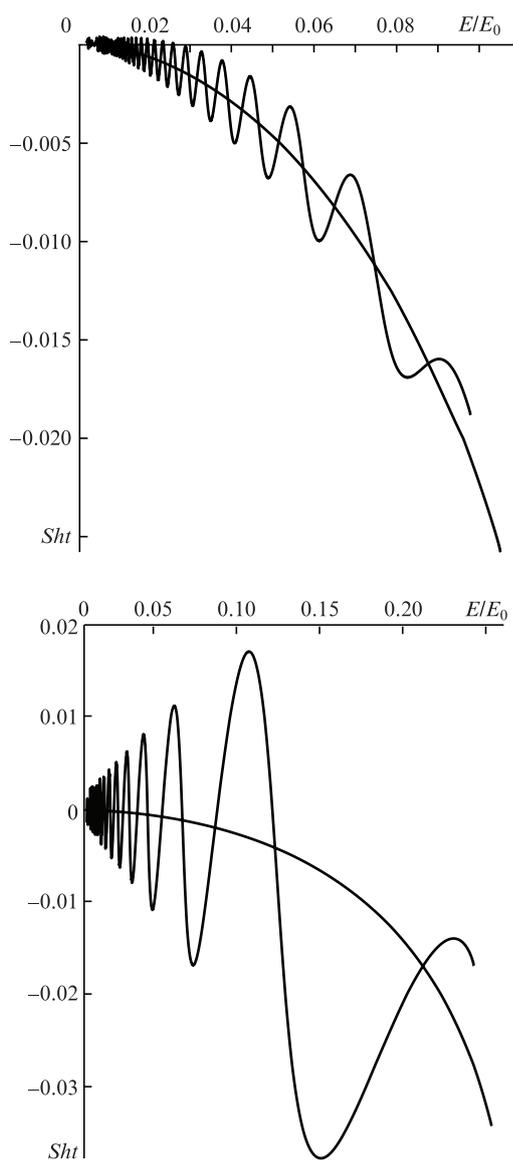


Рис.1. Зависимости величины штарковского сдвига от электрического поля для квантовых точек с радиусами 2.5 (а) и 3.5 нм (б). Здесь и на рис.2–4 монотонные кривые – расчет по формуле (16), осциллирующие – по точной формуле (13). Массы электронов во внутренней и внешней областях соответственно $m_{in}^* = 0.05m$, $m_{ex}^* = 0.1m$, относительная диэлектрическая проницаемость материала квантовой точки $\epsilon = 2$.

На рис.2 представлены зависимости сдвига от электрического поля при разных значениях относительной диэлектрической проницаемости материала квантовой точки. На наш взгляд, эти зависимости довольно любопытны. Расчет выполнен при тех же соотношениях масс, что и для рис.1, и при фиксированном радиусе квантовой точки $R = 3$ нм. Выбраны следующие значения диэлектрической проницаемости: $\epsilon = 0.25, 1, 4$. Видно, что сглаженные значения сдвига довольно слабо реагируют на изменения относительной диэлектрической проницаемости. Другими словами, усредненная величина сдвига слабо зависит от поля внутри потенциальной ямы. Такая независимость усиливается нашим приближением (4). Напротив, осциллирующая часть штарковского сдвига весьма чувствительна к внутреннему полю. Это, в общем, согласуется с логикой известного приближения псевдо-

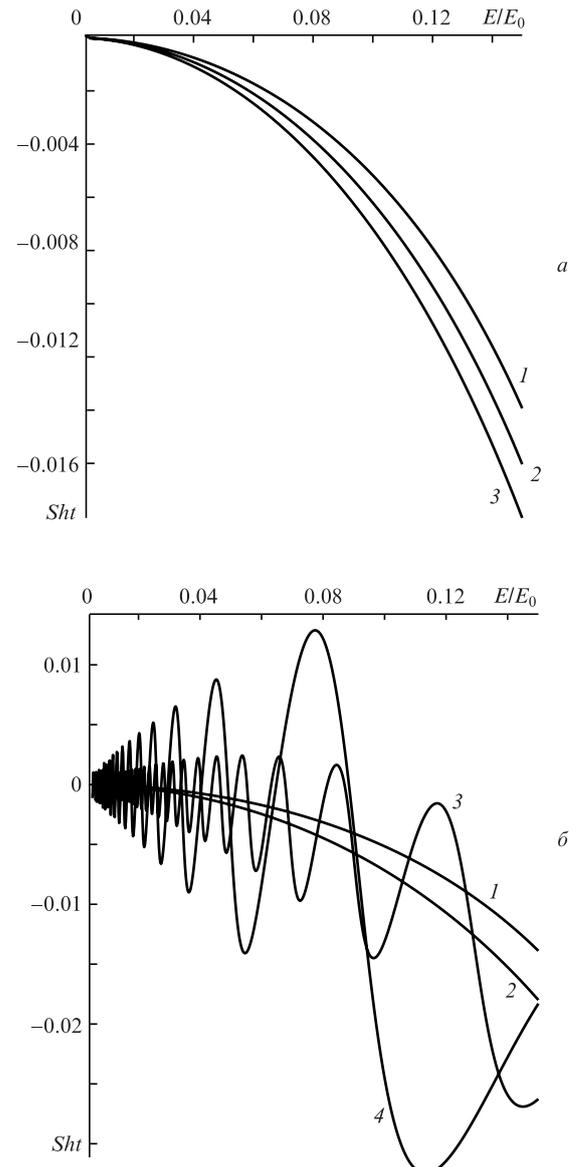


Рис.2. Зависимости величины штарковского сдвига от электрического поля для квантовых точек с радиусами 3 нм при $\epsilon = 0.25$ (1), 1 (2) и 4 (3) (а), а также при $\epsilon = 0.25$ (1, 4) и 4 (2, 3) (б). Единицы напряженности поля и энергии, а также массы электрона те же, что и на рис.1.

потенциала [9]. Ясно, что именно интерференционные эффекты, определяющие осцилляции сдвига, наиболее чувствительны к локальным изменениям волновой функции.

Перейдем теперь к рассмотрению зависимости ширины уровня (мнимой части комплексной энергии) от электрического поля. Напомним, что мнимая часть комплексной энергии связана с вероятностью распада состояния, а в нашем случае (один связанный уровень в яме) единственный возможный канал распада – переход электрона в зону проводимости матрицы (условно – ионизация). Таким образом, мнимая часть энергии – это вероятность ионизации в единицу времени. На рис.3 эта зависимость приведена для трех различных размеров квантовых точек. Используются те же единицы поля и энергии и те же значения постоянных, что и на рис.1. Как и ранее, для монотонных кривых использована приближенная формула (16), для осциллирующих – (13). Легко видеть, что осцилляции здесь менее значимы, чем для сдвига Штарка. Поведение их в зависимости от поля, в общем, носит тот

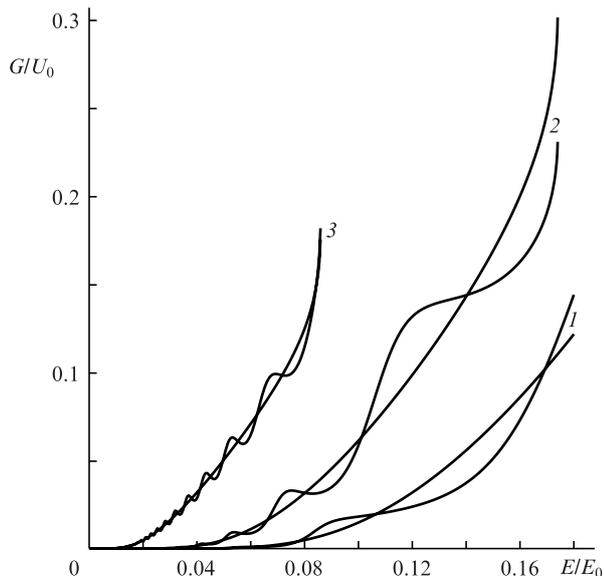


Рис.3. Зависимости ширины уровня от электрического поля для квантовых точек с радиусами 2.5 (1), 3 (2) и 3.5 нм (3) при эффективных массах электронов $m_{in}^* = 0.05m$, $m_{ex}^* = 0.1m$ и $\mathcal{E} = 2$.

же характер, что и в случае сдвига. Естественно, вероятность вырывания электрона из потенциальной ямы при данном поле тем меньше, чем шире яма. Область проведения расчетов ограничена, как и ранее, условием $\beta < 1$.

Зависимости ширины уровня от поля в одинаковых по размеру квантовых точках для разных значений диэлектрической проницаемости представлены на рис.4. Видны те же тенденции, что и на рис.2. Монотонные кривые практически неразличимы, несмотря на довольно значительную область изменения \mathcal{E} . Осцилляции в каком-то смысле проявляют различия диэлектрической проницаемости, скрытые в усредненных кривых. Частота осцилляций растет с ростом \mathcal{E} , т.е. с уменьшением напряженности электрического поля в объеме потенциальной ямы, т.к. она и внутри точки обратна напряженности поля.

В заключение остановимся кратко на роли переменной составляющей поля. Уравнения (13) и (16), с помощью ко-

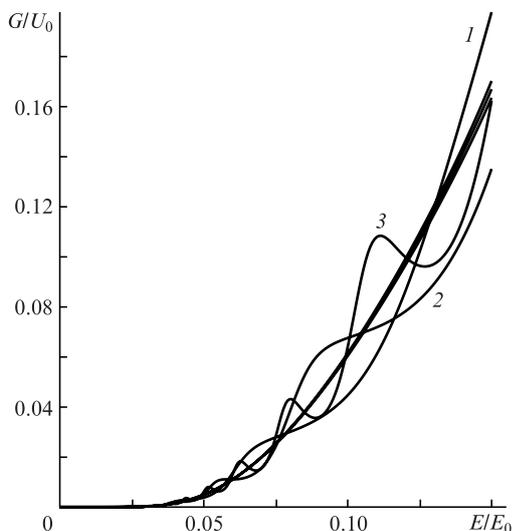


Рис.4. Зависимости ширины уровня от электрического поля для квантовых точек с радиусами 3 нм при $\mathcal{E} = 0.25$ (1), 1 (2) и 4 (3); монотонные кривые практически совпадают. Эффективные массы электронов те же, что и на рис.3.

торых определяется значение комплексной энергии, имеют для постоянного поля общий вид:

$$f_1(E) = f_2(E). \quad (17)$$

Для грубой оценки влияния переменного поля световой волны сделаем замену $E \rightarrow E_0 + \Delta E \sin(\omega t)$, причем будем считать, что постоянные величины здесь связаны соотношением $E_0 \gg \Delta E$. Поскольку граничные условия (13), (16) выполняются в каждый момент времени, значения комплексной энергии должны осциллировать со временем с частотой ω . Эти осцилляции накладываются на собственные осцилляции в постоянном поле, связанные с конечными размерами квантовой точки (см. рис.1–4). Такое наложение может приводить к интересным резонансным явлениям, подробное исследование которых выходит далеко за рамки данной статьи.

Здесь мы ограничимся адиабатическим приближением в простейшем варианте. Усредним по периоду предыдущее соотношение,

$$\frac{1}{T} \int_0^T f_1(E, t) dt = \frac{1}{T} \int_0^T f_2(E, t) dt, \quad (18)$$

и учтем малость амплитуды периодического возмущения на фоне постоянной составляющей поля:

$$f_{1,2}(E, t) \approx f_{1,2}(E_0) + \frac{df_{1,2}(E_0)}{dE} \Delta E \sin(\omega t) + \frac{1}{2} \frac{d^2 f_{1,2}(E_0)}{dE^2} \Delta E^2 \sin^2(\omega t).$$

После усреднения по периоду соотношение (18), определяющее комплексную энергию уровня, трансформируется следующим образом:

$$f_1(E_0) + \frac{1}{4} \frac{d^2 f_1(E_0)}{dE^2} \Delta E^2 = f_2(E_0) + \frac{1}{4} \frac{d^2 f_2(E_0)}{dE^2} \Delta E^2.$$

Легко видеть, что даже в таком примитивном варианте положение с влиянием поля волны неоднозначно. Из рис.1–4 видно, что для монотонных зависимостей, следующих из формулы (16), как и можно было ожидать, добавка от переменного поля в адиабатическом приближении весьма мала. В то же время, согласно точной формуле (13), резонансные явления в суперпозиции постоянного поля и поля световой волны вполне возможны, и возможность эта обусловлена именно конечными размерами потенциальной ямы. В приближении дельта-потенциала они, как и осцилляции сдвига Штарка и ширины уровня, пропадают.

Исходя из полученных результатов следует сделать два замечания.

1. Предлагаемый нами метод регуляризации гамовских квазистационарных состояний не так универсален, как метод Зельдовича. Однако в ситуациях, когда расходимости порождаются именно влиянием электрического поля, он может быть полезен. Наш метод приводит к более простым и лучше сходящимся выражениям.

2. Влияние электрического поля на поведение связанных одноэлектронных состояний в ямах конечной глубины и размеров (типа квантовых точек) гораздо сложнее и многообразнее, чем предсказывает приближение дельта-

потенциала. Главная причина этой дополнительной сложности – осцилляции как реальной, так и мнимой частей комплексной энергии связанной частицы в постоянном поле. Они имеют место только в потенциальной яме конечных размеров и принципиально не воспроизводимы ни в приближении дельта-потенциала, ни при использовании теории возмущений.

Итак, в настоящей работе построена теоретическая модель, описывающая энергетический спектр трехмерной квантовой точки во внешнем постоянном и слабом переменном электрическом полях, не использующая приближение дельта-потенциала или теорию возмущений. Для этого предложен простой метод регуляризации гамовской волновой функции и на его основе рассчитана комплексная энергия электрона, описывающая как оптический спектр системы, так и вероятность распада состояния (автоионизацию). Обнаружен эффект осциллирующий штарковского сдвига и ширины уровня в постоянном электрическом поле, возможный только в потенциальной яме конечных размеров и глубины.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант № 3.6634.2017/6.7) и РФФИ (грант № 16-07-00289).

1. Федорович С.В., Проценко И.Е. *Квантовая электроника*, **46**, 45 (2016) [*Quantum Electron.*, **46**, 45 (2016)].
2. Мелентьев П.П., Кузин А.А., Балыкин В.И. *Квантовая электроника*, **47**, 266 (2017) [*Quantum Electron.*, **47**, 266 (2017)].
3. Эминов П.А., Гордеева С.В. *Квантовая электроника*, **42**, 733 (2012) [*Quantum Electron.*, **42**, 733 (2012)].
4. Саранцева Т.С., Силаев А.А., Веденский Н.А., Фролов М.И., Манаков Н.Л. *Квантовая электроника*, **46**, 366 (2016) [*Quantum Electron.*, **46**, 366 (2016)].
5. Зегря Г.Г., Самохват Д.М. *ЖЭТФ*, **135**, 1043 (2009).
6. Игошина С.Е., Карманов А.А. *Квантовая электроника*, **43**, 76 (2013) [*Quantum Electron.*, **43**, 76 (2013)].
7. Никишов А.И., Ритус В.И. *Труды ФИАН*, **168**, 232 (1986).
8. Gamow G.A. *Zeitschrift fur Phys.*, **51**, 204 (1928).
9. Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М.: Наука, 1971, с. 21, 168).
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974, с. 634).
11. Демков Ю.Н., Друкарев Г.Ф. *ЖЭТФ*, **47**, 918 (1964).
12. Манаков Н.Л., Фролов М.В., Борка Б., Старасе А.Ф. *Письма в ЖЭТФ*, **72**, 426 (2000).
13. Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М. *Теоретическая и математическая физика*, **145**, 198 (2005).
14. Мур В.Д., Поздняков С.Г., Попов В.С., Попруженко С.В. *Письма в ЖЭТФ*, **75**, 294 (2002).
15. Леденцов В.М., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. *ФТП*, **32**, 385 (1998).
16. Шик А.Я., Бакуева Л.Г., Мусихин С.Ф., Рыков С.А. *Физика низкоразмерных систем* (СПб.: Наука, 2001, с. 62).
17. Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Оптич. журн.*, **82** (5), 3 (2015).
18. Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Оптич. журн.*, **82** (5), 11 (2015).
19. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И. *Электромагнитные волны и электронные системы*, № 6, 67 (2014).
20. Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Шарц А.А. *Радиотехника и электроника*, **60**, 1073 (2015).
21. Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum Mechanics and Part Integrals* (New York: McGraw-Hill Book Company, 1965, p. 76).
22. Манаков Н.Л., Рапопорт Л.П. *ЖЭТФ*, **69**, 842 (1975).
23. Ансельм А.И. *Введение в теорию полупроводников* (М.: Наука, 1978, с. 445).
24. Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М. *Теоретическая и математическая физика*, **164**, 157 (2010).
25. Нуссинцевейг Х.М. *Причинность и дисперсионные соотношения* (М.: Мир, 1976, с. 27).
26. Демков Ю.Н., Островский В.Н. *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике* (Л: Изд. ЛГУ, 1975, с. 10).
27. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Электродинамика сплошных сред* (М.: Наука, 1982, с. 64).