

# Управление электронными корреляциями в сферической квантовой точке

© Ю.Е. Лозовик, С.Ю. Волков

Институт спектроскопии Российской академии наук,  
142092 Троицк, Московская обл., Россия

E-mail: lozovik@isan.msk.su

(Поступила в Редакцию 7 февраля 2002 г.)

Рассмотрены сферические квантовые точки с несколькими электронами при различных значениях полного спина. Моделирование проводится квантовым методом Монте-Карло интегрирования по траекториям. Изучается зависимость корреляций электронов от управляющего безразмерного квантового параметра  $q$ , связанного с крутизной удерживающего потенциала. Детально изучен квантовый переход — „холодное плавление“ — из вигнеровского кристаллоподобного состояния (соответствующего режиму сильно коррелированных электронов) в фазу ферми-жидкости при изменении параметра  $q$ . Рассмотрено поведение парной корреляционной и радиальной функций, характеризующих квантовую делокализацию электронов.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований, ИНТАС и программой „Физика твердотельных наноструктур“.

Свойства электронных систем в квантовых точках представляют большой интерес, в особенности в области сильной корреляции электронов [1–5]. Режим сильной корреляции электронов может быть достигнут уменьшением плотности электронной системы с помощью изменения крутизны потенциала, например с использованием управляющего электрода [6] или перпендикулярного магнитного поля [7,8]. Эта особенность отличает квантовые точки — гигантские искусственные атомы — от „естественных“ атомов с достаточно слабо скоррелированными электронами (для всех атомов корреляционная энергия всегда меньше хартри-фоковской энергии). Поэтому очень важно детальное исследование характеристик квантовых точек во всем диапазоне изменения безразмерного квантового параметра, управляющего корреляцией электронов, в частности изучение кристаллизации электронов и квантового „холодного“ плавления.

Существует еще один интересный аспект этой проблемы — поведение протяженной электронной системы в случайном потенциале, образованном примесями или неровностями поверхности раздела. В этом случае достаточно разреженная электронная система разбивается на кластеры вблизи минимумов случайного потенциала. Таким образом, анализ электронной системы в изолированной квантовой точке дает некоторое представление о ближнем порядке в неупорядоченной электронной системе и его изменении при росте квантового безразмерного параметра (для протяженных систем квантовый параметр  $q$  связан с безразмерным параметром  $r_s$ , характеризующим среднее расстояние между электронами в единицах электронного радиуса:  $4\pi/3r_s^3 a_0^3 = 1/n$ , где  $a_0 = \hbar^2 \epsilon / (m^* e^2)$  — эффективный борковский радиус,  $n$  — плотность электронов).

В настоящей работе мы детально исследуем систему нескольких электронов в сферической квантовой точке с параболическим удерживающим потенциалом  $\alpha r^2$ . Все

свойства системы при низкой температуре зависят только от безразмерного квантового параметра  $q$ , связанного с крутизной удерживающего потенциала. Мы изучаем свойства сферической квантовой точки с несколькими электронами в зависимости от  $q$  и полного спина системы. Для моделирования используем *ab initio* квантовый метод Монте-Карло интегрирования по траекториям (PIMC) для фермионов.

При малом значении параметра  $q$  характерная квантовая кинетическая энергия мала, система электронов становится сильно коррелированной и в пределе малых  $q$  образует кристаллоподобный, почти классический электронный кластер (см. [1–4]). Эта кристаллическая структура размывается при больших значениях параметра  $q$  из-за квантовых нулевых колебаний, и кластер испытывает квантовый („холодный“) переход кристалл–ферми-жидкость. Наконец, при больших значениях квантового параметра динамические корреляции в электронной системе становятся такими же малыми, как и в естественных атомах.

Мы изучим ряд характеристик системы нескольких электронов в квантовой точке (радиальные и парные корреляционные функции, полную и обменную энергии, среднее расстояние между частицами) и проанализируем роль ферми-статистики в поведении исследуемых величин.

## 1. Модель квантовой точки

Рассмотрим систему кулоновских частиц в трехмерном (3D) параболическом удерживающем потенциале как модель сферической квантовой точки. Этот потенциал хорошо описывает реальные квантовые точки с небольшим числом электронов. Гамильтониан системы есть

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N \frac{m\omega^2}{2} r_i^2 + \sum_{i < j}^N \frac{\epsilon^2}{\epsilon |r_i - r_j|}.$$

Будем использовать безразмерные величины для длины, энергии и температуры:  $r' = r/r_0$ ,  $E' = E/E_0$ ,  $T' = T/E_0$ . Введем единицы длины и энергии:  $r_0 = (2e^2\varepsilon/(m\omega^2))^{1/3}$ ,  $E_0 = e^2/(\varepsilon r_0) = m\omega^2 r_0^2/2$ . В безразмерных переменных гамильтониан примет вид

$$H = - \sum_i^N q \nabla_i^2 + \sum_i^N r_i^2 + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}},$$

где  $q = \hbar^2/(2m)(m\omega^2\varepsilon^4/(2e^8))^{1/3}$  — безразмерный квантовый параметр системы. Его можно выразить через отношение эффективного борновского радиуса  $a_0^*$ , связанного с эффективным взаимодействием зарядов, и одночастичной длины  $l = (\hbar/(m^*\omega))^{1/2}$  (характерный размер волновой функции одного электрона в параболическом удерживающем потенциале):  $q = (a_0^*/2l)^{4/3}$ .

Далее будем изучать поведение системы в зависимости от безразмерного параметра  $q$ . Экспериментально им можно управлять путем изменения величины удерживающего потенциала, что осуществляется с помощью управляющего электрода.

## 2. Измеряемые величины

При моделировании системы рассчитывались следующие величины, характеризующие данную систему: радиальное распределение частиц

$$\rho(r) = \sum_i^N \frac{\delta(r_i - r)}{4\pi r^2 \Delta r};$$

парная корреляционная функция

$$f(r) = \sum_{i<j}^N \frac{\delta(r_{ij} - r)}{4\pi r^2 \Delta r};$$

полная энергия системы

$$E = \frac{3}{2} NMT + \frac{1}{M} \sum_{i,m} \left( -\frac{(r_i^m - r_i^{m-1})^2}{4q\tau^2} + \frac{1}{2} (r_i^m)^2 \right) + \frac{1}{M} \sum_{i<j,m} \left( \frac{1}{|r_i^m - r_j^m|} \right);$$

(здесь  $\tau = 1/(MT)$  — шаг интегрирования по обратной температуре); ширины на полувысоте всех распределений; среднее число частиц, участвующих в перестановке,  $\langle N \rangle$ ; среднее расстояние между частицами  $\langle a \rangle$ .

Исследовалась зависимость указанных величин от квантового параметра  $q$  при фиксированной малой температуре, которая поддерживалась постоянной в осцилляторной системе единиц и была равна  $T = 0.3\hbar\omega$ .

Усреднение по шагам Монте-Карло величины  $A$  производится следующим образом:

$$\langle A \rangle = 1/N_{\text{эфф}} \sum p_i A_i,$$

$$A_i = \int \dots \int dR_0 dR_1 \dots dR_{M-1} \langle R_0 | A | R_M \rangle \exp\left(-\sum_{m=1}^M S^m\right),$$

где  $p_i$  — четность перестановки,  $p_0 = 1$ ,  $N_{\text{эфф}} = \sum p_i$  — эффективная длина марковской цепочки. Каждая перестановка пары ферми-частиц с одинаковым спином изменяет знак  $p_i$ .

## 3. Обсуждение результатов

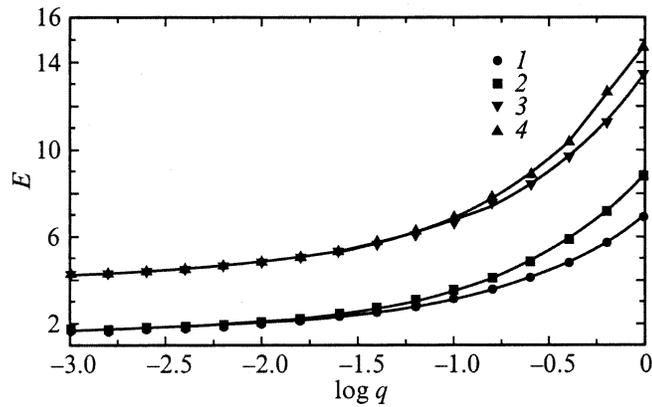
На рисунках представлены зависимости от квантового параметра  $q$  полной и обменной энергий, а также следующих величин, характеризующих корреляцию электронов (в частности, их кристаллизацию) в квантовой точке: радиальных распределений, ширин радиальных распределений, положений максимумов радиальных и парных корреляционных функций. Мы также иллюстрируем локализацию электронов в квантовой точке с помощью проекции пучка фейнмановских траекторий (в мнимом времени) на плоскость в трехмерном пространстве, на которой локализованы электроны в классическом пределе  $q = 0$ .

Будем использовать следующие обозначения: состояние с  $N = 3$ ,  $S = 1/2$  означает трехэлектронную систему с полным спином  $1/2$  и т.д. Поскольку мы не принимаем во внимание спин-орбитальное взаимодействие, полный спин системы определяет только симметрию координатной волновой функции. В отсутствие внешнего магнитного поля система вырождена по проекциям спина. Таким образом, состояния с разными проекциями спина имеют одинаковые координатные волновые функции.

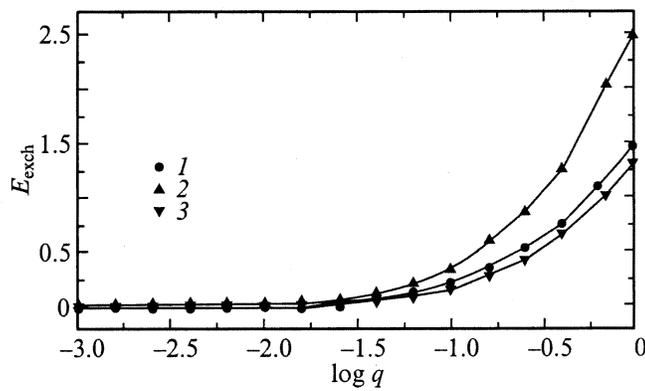
В пределе  $q \rightarrow 0$  рассматриваемая система эквивалентна классическому трехмерному атому Томсона (см. [1,4]). В равновесном состоянии для классической системы двух электронов среднее расстояние между частицами  $\langle a \rangle = 1$ , полный потенциал  $V = 3/2$ ; классическая трехэлектронная система образует равносторонний треугольник с  $\langle a \rangle = (3/2)^{1/3} \approx 1.445$ ,  $V \approx 3.93$ . При достаточно малых значениях  $q$  результаты наших расчетов хорошо согласуются с этими классическими значениями.

Мы исследовали систему в области значений квантового параметра  $q = 10^{-3} - 1$ .

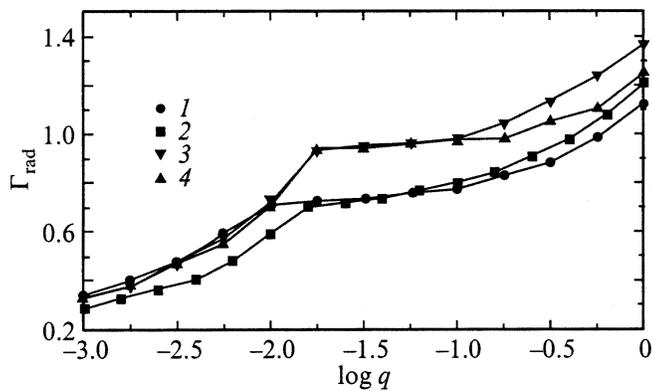
Полные энергии системы с двумя и тремя электронами монотонно возрастают с увеличением квантового параметра. Состояния с  $S = 0$  и  $1/2$  являются энергетически выгодными в исследуемой области значений квантового параметра  $q$  для двух и трех электронов с точностью до ошибки расчетов (рис. 1). Обменная энергия, которую мы определили как разность полной энергии ферми-системы и „большмановской“ системы



**Рис. 1.** Полная энергия системы в зависимости от квантового параметра  $q$ .  $N = 2$  (1, 2) и 3 (3, 4).  $S = 0$  (1), 1 (2), 1/2 (3) и 3/2 (4).



**Рис. 2.** Обменная энергия  $E_{\text{exch}}$  как функция квантового параметра  $q$ .  $N = 2$  (1) и 3 (2, 3).  $S = 1$  (1), 1/2 (2) и 3/2 (3).



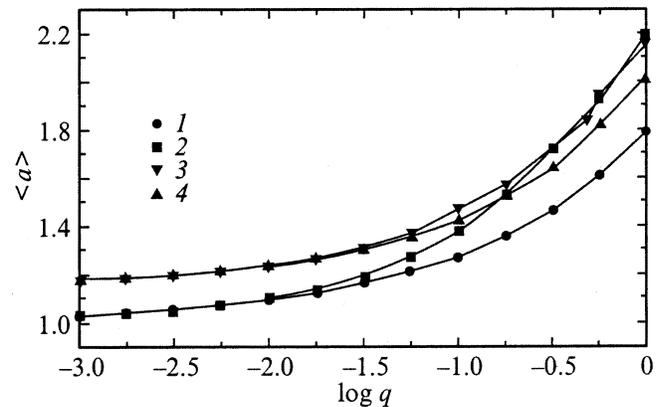
**Рис. 3.** Ширина радиального распределения  $\Gamma_{\text{rad}}$ , в зависимости от  $q$ .  $N = 2$  (1, 2) и 3 (3, 4).  $S = 0$  (1), 1 (2), 1/2 (3) и 3/2 (4).

нетождественных частиц в том же удерживающем потенциале, монотонно растет с увеличением  $q$  (рис. 2).

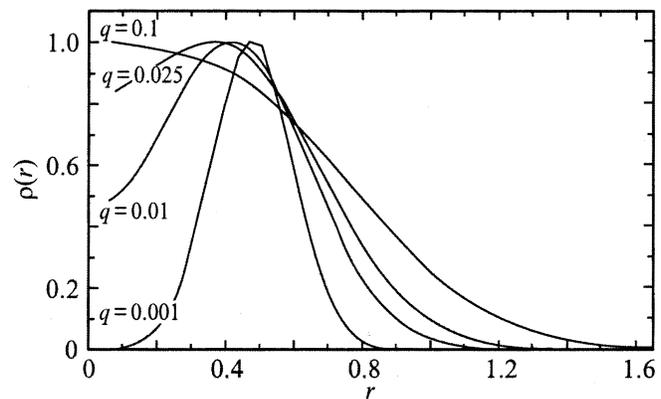
Как оказалось, статистика Ферми начинает играть существенную роль для двух частиц при  $\log q \approx -1.25$ .

При этом значении  $q$  обменная энергия, которая непосредственно связана со статистикой, начинает существенно возрастать как функция  $q$  (рис. 2). Роль статистики Ферми можно увидеть также из зависимости среднего числа частиц  $\langle N \rangle$ , участвующих в перестановках, от  $q$ . Эта величина начинает резко расти почти при том же значении  $q$ , что и обменная энергия. Для трех электронов статистика Ферми начинает играть существенную роль при  $q \approx 1.75$ .

При росте квантового параметра  $q$  система испытывает квантовый переход — кроссовер из „кристаллической“ структуры в делокализованное состояние фермижидкости. Положение области перехода определяется условием примерного равенства удвоенной ширины электронного распределения среднему расстоянию между частицами:  $\langle a \rangle \approx 2\Gamma_{\text{rad}}$  (рис. 3). Среднее расстояние между частицами начинает монотонно увеличиваться с ростом квантового параметра  $q$  (от своего классического значения). Из-за дополнительного статистического отталкивания среднее расстояние между электронами для состояний с большим полным спином возрастает с ростом  $q$  быстрее, чем в случае состояний с меньшим полным спином (рис. 4).



**Рис. 4.** Среднее расстояние между частицами  $\langle a \rangle$  как функция  $\log q$ .  $N = 2$  (1, 2) и 3 (3, 4).  $S = 0$  (1), 1 (2), 1/2 (3) и 3/2 (4).



**Рис. 5.** Эволюция радиального распределения с ростом квантового параметра  $q$ .  $S = 1$ ,  $N = 2$ .

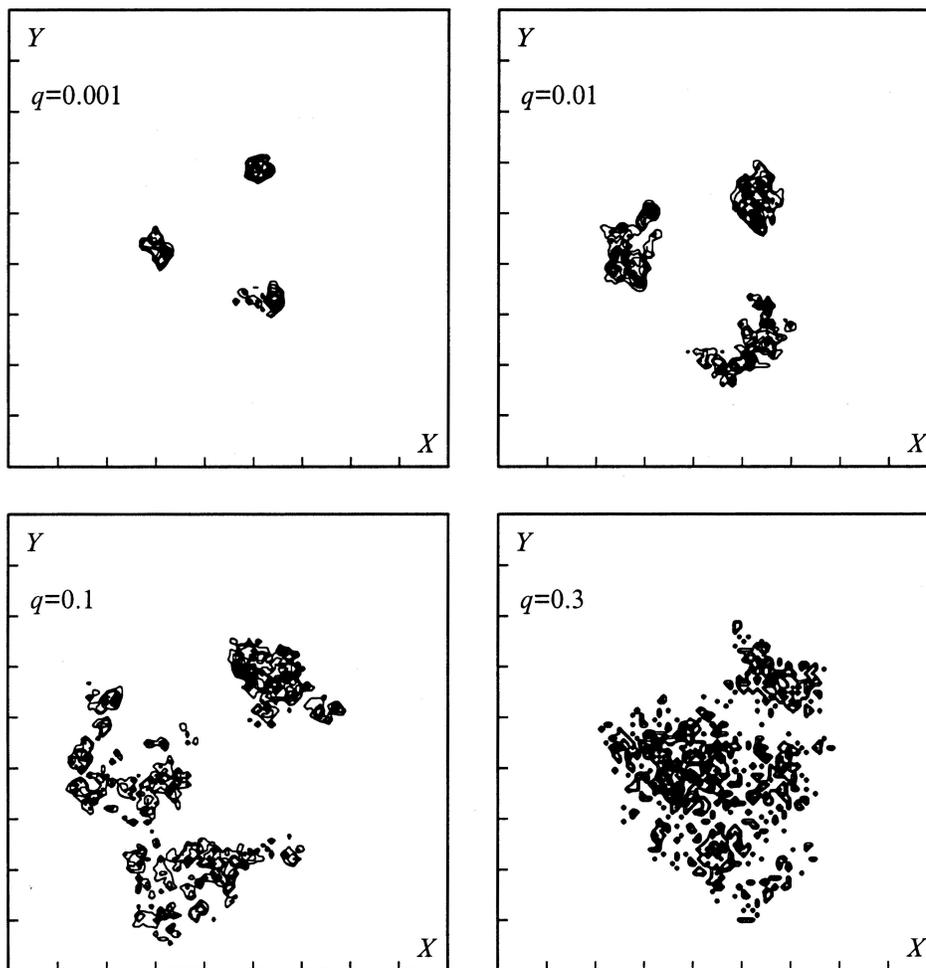


Рис. 6. Проекция электронных траекторий в мнимом времени при различных значениях параметра  $q$ .

Интересно проанализировать эволюцию радиального распределения в том случае, когда система испытывает кроссовер от режима сильной корреляции к слабой (рис. 5). Для удобства мы нормировали радиальное распределение так, чтобы его максимум равнялся единице. При малых  $q$  это узкое распределение, и его значение в точке  $r = 0$  равно нулю. Таким образом, при малых  $q$  электроны сильно локализованы и образуют „кристаллическую“ структуру. С ростом  $q$  ширина распределения увеличивается. При значении  $\log q = -1.0$  это достаточно широкое по сравнению с исходным распределением с максимумом в точке  $r = 0$ . Таким образом, с ростом  $q$  произошло квантовое плавление и электроны „размылись“ по квантовой точке (рис. 6). Ширины парных корреляционных функций также описывают квантовую делокализацию электронов: они монотонно растут для системы с двумя и тремя электронами.

В заключение отметим основные результаты работы.

1) Состояния  $S = 0$  и  $1/2$  являются энергетически выгодными для трехмерных квантовых точек с двумя и тремя электронами соответственно.

2) Обнаружен переход системы электронов в сферической квантовой точке с ростом управляющего кван-

тового параметра из „кристаллизованного“ состояния (режим сильной корреляции электронов) в разупорядоченное делокализованное состояние (ферми-жидкость), т. е. квантовое („холодное“) плавление.

## Список литературы

- [1] A.V. Filinov, Yu.E. Lozovik, M. Bonitz. Phys. Rev. Lett. **87**, 21, 216 804 (2001); Ю.Е. Лозовик. УФН **153**, 356 (1987).
- [2] B. Reusch, W.Hausler, H. Grabert. Phys. Rev. **63**, 11, 113 313 (2001); R. Egger, W. Hausler, C.H. Mak, H. Grabert. Phys. Rev. Lett. **82**, 16, 3320 (1998).
- [3] C. Yannouleas, U. Landman. Phys. Rev. Lett. **85**, 8, 1726 (2000); C. Yannouleas. Phys. Rev. B **61**, 23, 15 895 (2000).
- [4] Yu.E. Lozovik, V.A. Mandelshtam. Phys. Lett. A **145**, 269 (1991); Yu.E. Lozovik, E.A. Rakoch. Phys. Lett. A **235**, 55 (1997).
- [5] N.A. Bruce, P.A. Maksym. Phys. Rev. B **61**, 7, 4718 (2000).
- [6] R.C. Ashoori. Nature (London) **379**, 413 (1996).
- [7] Ю.Е. Лозовик, В.И. Юдсон. Письма в ЖЭТФ, **22**, 551 (1975).
- [8] D.M. Ceperley. Rev. Mod. Phys. **67**, 2, 279 (1995).