



Efekty wieloelektronowe w nanoukładach: ścisłe wyniki dla nanostruktury kropka - pierścień

Andrzej P. Kądziaława^{1†}, Andrzej Biborski², A. Gorczyca-Goraj³, E. Zipper³, M. M. Maśka³, Józef Spałek^{1,2}

¹Institut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński, ul. Łojasiewicza 11, PL-30-348 Kraków

²Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii, AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Al. Mickiewicza 30, PL-30-059 Kraków

³Institut Fizyki, Uniwersytet Śląski, ul. Uniwersytecka 4, PL-40-007 Katowice

†kadzialawa@th.if.uj.edu.pl



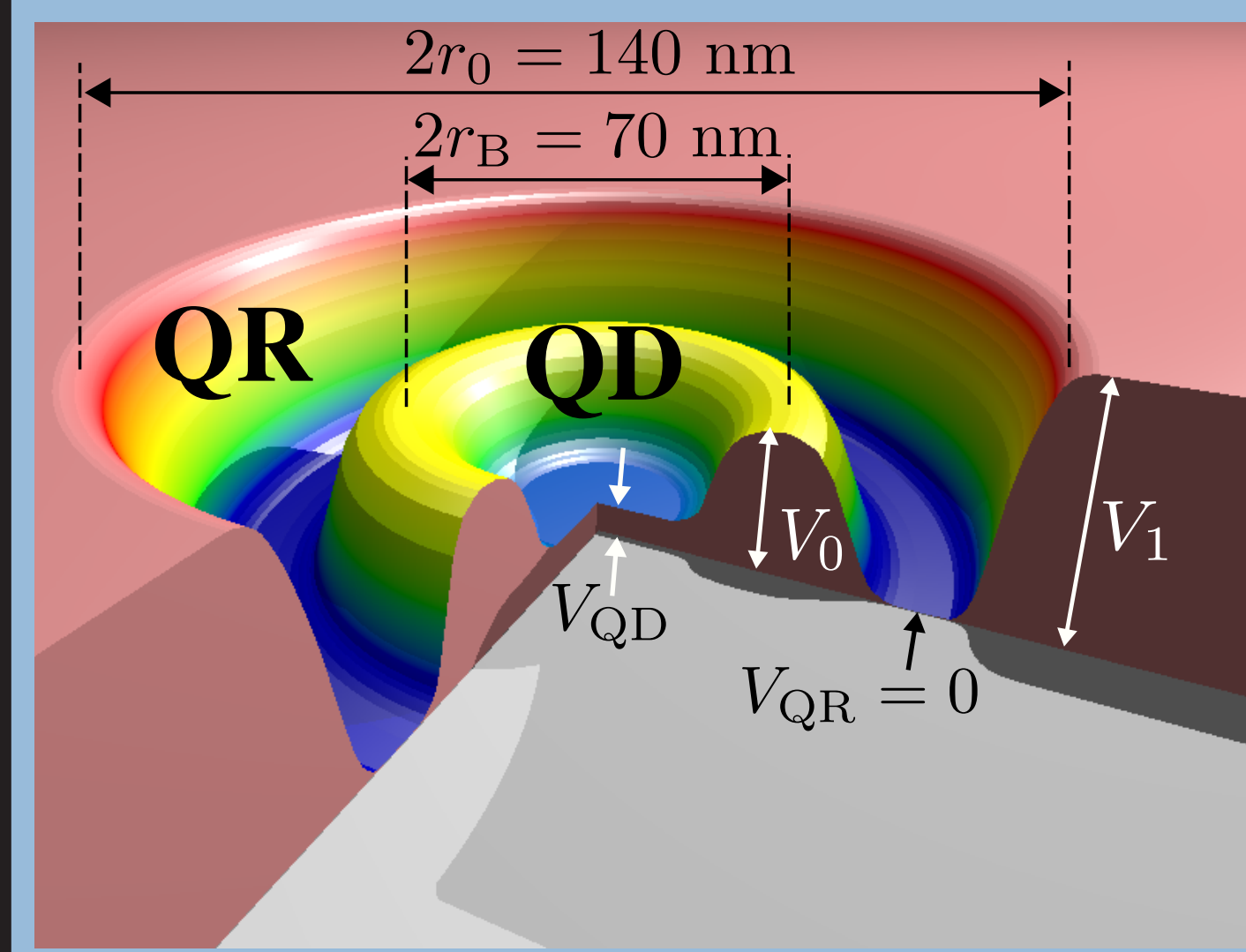
MOTYWACJA

Układy kropka kwantowa (QD) – nanopierścieni (QR) tworzą ciekawy układ nanofizyczny (DRN). Postuluje się, że takie struktury podatne będą na tzw. *inżynierię funkcji falowej*, pozwalającą na sterowanie właściwościami transportowymi, czy optycznej absorpcji układu przy zmianie potencjału kropki [1,2]. Stąd pojawia się pytanie o właściwości takiego układu dla $N_e > 1$ elektronów.

Naszym celem jest:

- jawne wyliczenie wyrazów oddziaływania kulombowskiego,
- wyznaczenie stanów wieloelektronowych układu,
- określenie widma energetycznego i stopni degeneracji rozwiązań stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego,
- wykreślenie prawdopodobieństwa znalezienia elektronu w kropce i pierścieniu.

PROBLEM JEDNOCZĄSTKOWY



Schemat potencjału układu kropka kwantowa – pierścień

Rozwiązaniem problemu jednocząstkowego

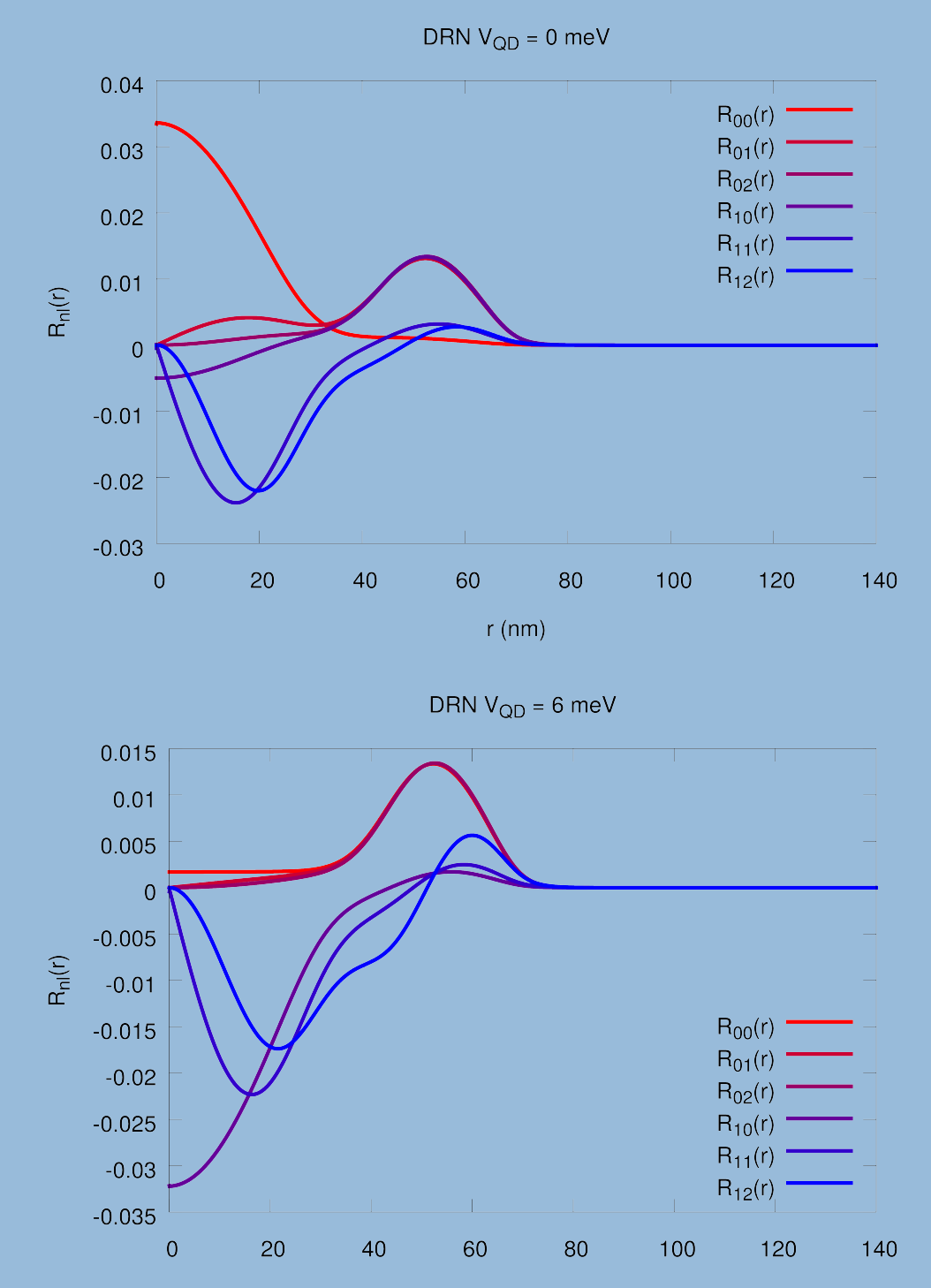
$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r})\right)\psi_{nl}(\mathbf{r}) = \epsilon_{nl}\psi_{nl}(\mathbf{r}),$$

z potencjałem układu kropka kwantowa – pierścieni (jak z lewej) są funkcje falowe [1,2] w postaci

$$\psi_{nl}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\exp(i\ell\phi).$$

Dla przypadku zdegenerowanego $\epsilon_{nl} = \epsilon_{n\bar{l}}$ i $R_{nl}(r) = R_{n\bar{l}}(r)$ możemy wyróżnić rzeczywiste rozwiązania w postaci

$$\varphi_{nl}(\mathbf{r}) = \frac{\psi_{nl}(\mathbf{r}) + \text{sgn}(\ell)\psi_{n|\bar{l}}(\mathbf{r})}{\sqrt{2\text{sgn}(\ell)}}.$$



METODA

Opis układu wieloelektronowego rozpoczynamy od operatorów pola:

$$\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{i=1, \sigma=\pm 1}^M \varphi_{i\sigma}(\mathbf{r})\hat{c}_{i\sigma}; \quad \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \equiv (\hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}))^\dagger,$$

gdzie $\{\varphi_{i\sigma}\}$ stanowi orthonormalną bazę jednocząstkowych funkcji falowych, a $\hat{c}_{i\sigma}$ ($\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$) to operatory anihilacji i kreacji elektronu o spinie σ na orbitalu i . Ostatecznie hamiltonian wieloelektronowy przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\equiv \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{H}_1 \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3r d^3r' \hat{\Psi}_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\sigma(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\sigma'} V_{ijkl} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l\sigma'} \hat{c}_{k\sigma}, \end{aligned}$$

gdzie

$$t_{ij} = \int d^3r \varphi_i^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_1 \varphi_j(\mathbf{r}),$$

$$V_{ijkl} = \iint d^3r d^3r' \varphi_i^*(\mathbf{r}) \varphi_j^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \varphi_l(\mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r}).$$

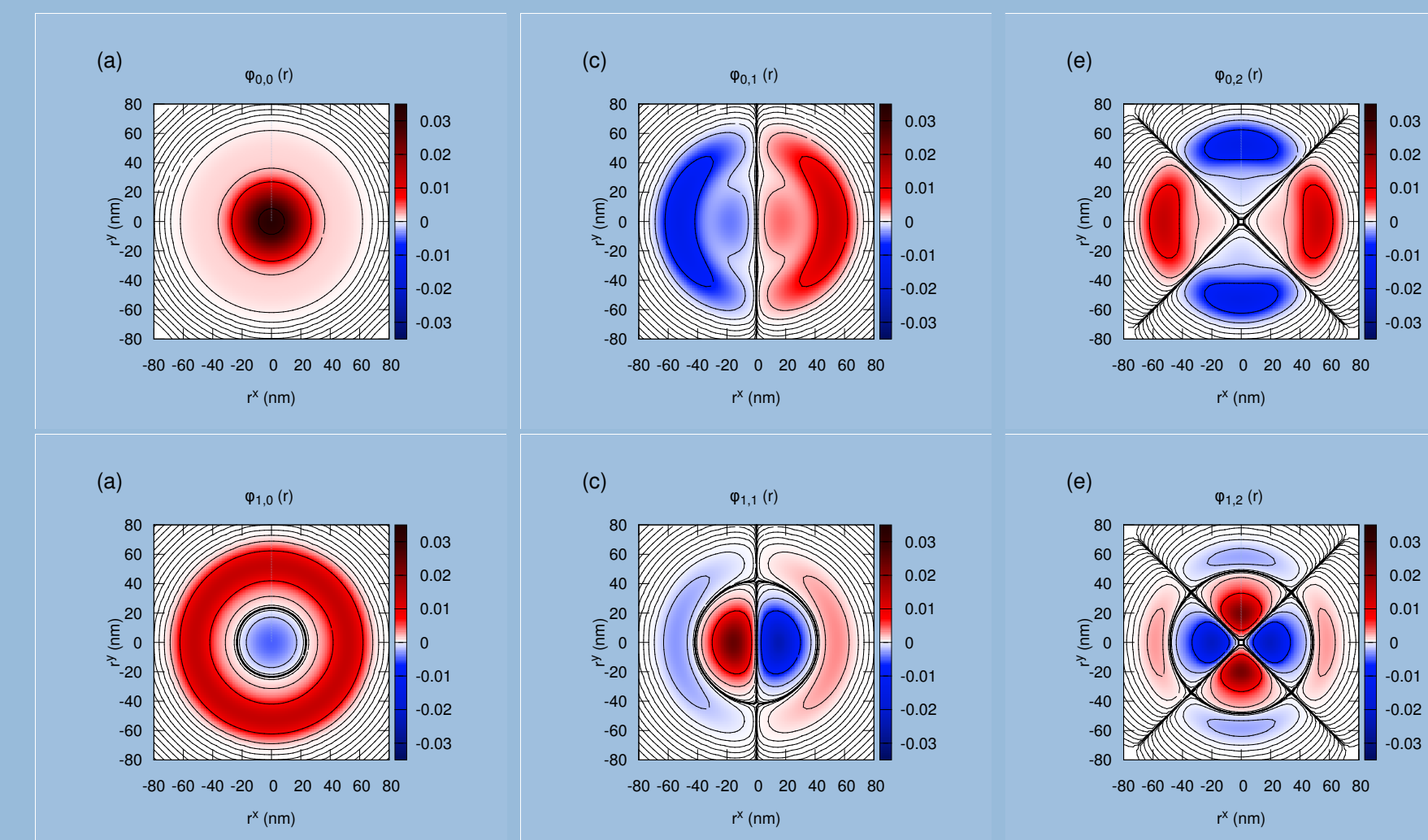
Hamiltonian diagonalizowany jest dla ustalonej, dostatecznie dużej, skórzonowej bazy funkcji jednocząstkowych, ustalającej parametry mikroskopowe t_{ij} , V_{ijkl} (patrz ramka Parametry mikroskopowe).

Jako bazę jednocząstkowych funkcji falowych (patrz ramka Baza funkcji jednocząstkowych) wybieramy funkcje własne hamiltonianu jednocząstkowego \mathcal{H}_1 o najniższych wartościach energii, co skutkuje uproszczeniem

$$t_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij},$$

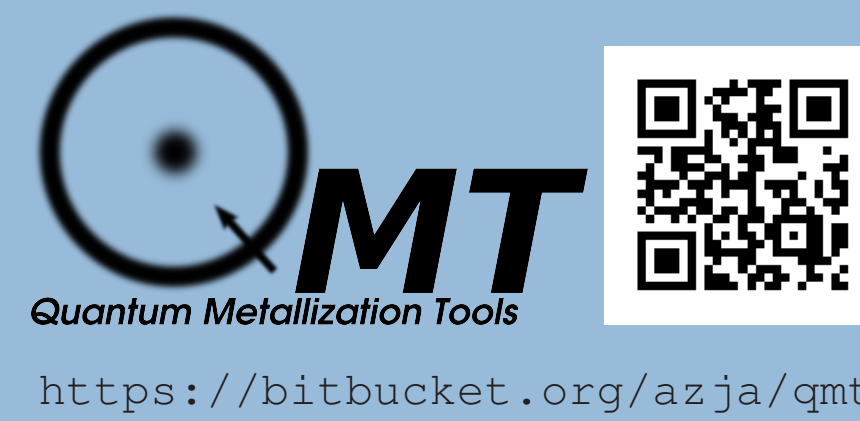
gdzie ϵ_i to energia jednocząstkowa, a δ_{ij} delta Kroneckera.

BAZA FUNKCJI JEDNOCZĄSTKOWYCH



Wybrane jednocząstkowe funkcje falowe w bazie rzeczywistej $\{\varphi_i\}$ dla wartości potencjału w kropce kwantowej $V_{QD} = 0 \text{ meV}$.

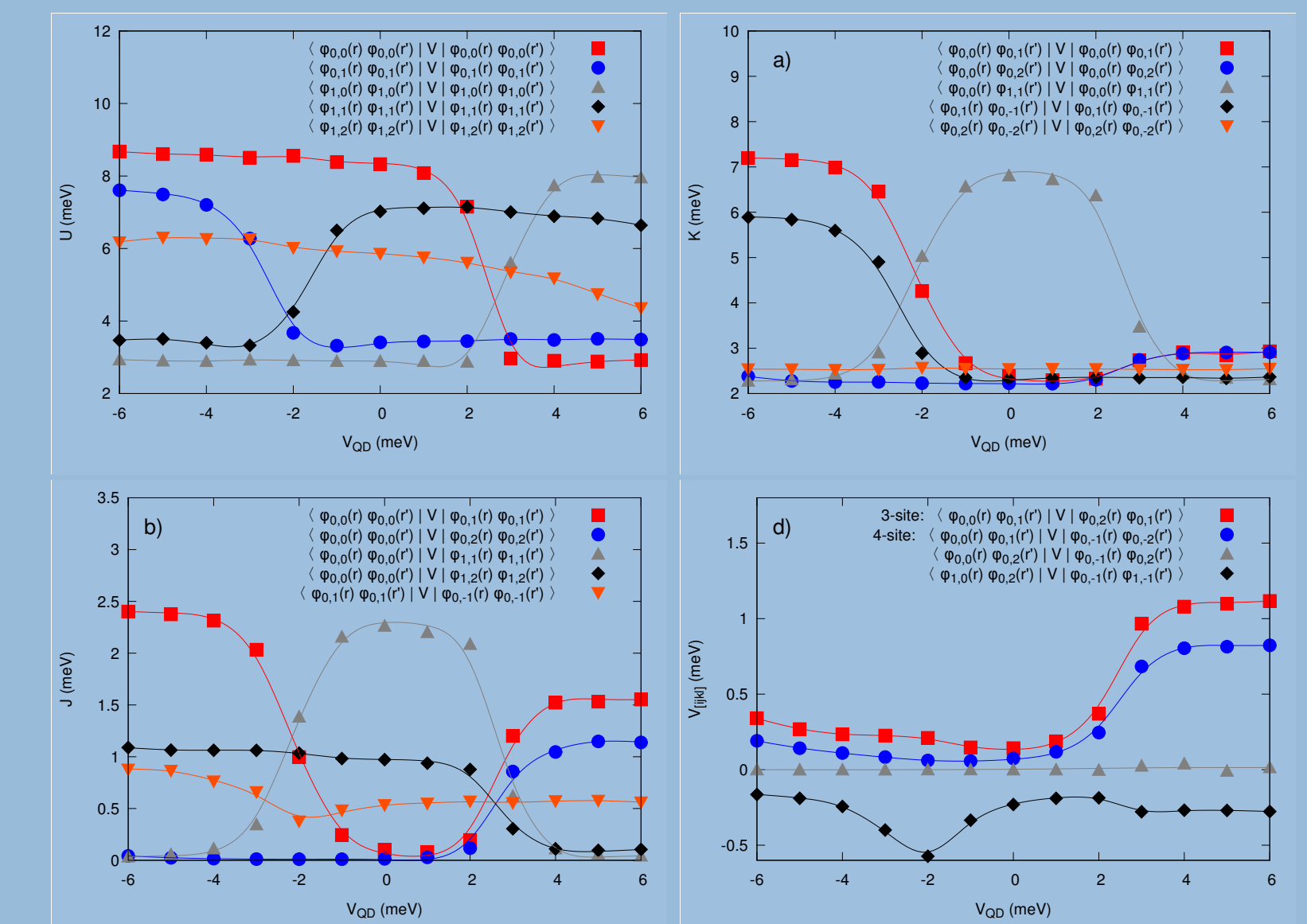
QUANTUM METALLIZATION TOOLS



<https://bitbucket.org/azja/qmt>

Obliczenia zostały wykonane korzystając z biblioteki QMT, pozwalającej na szybkie rozwiązywanie podobnych problemów [3].

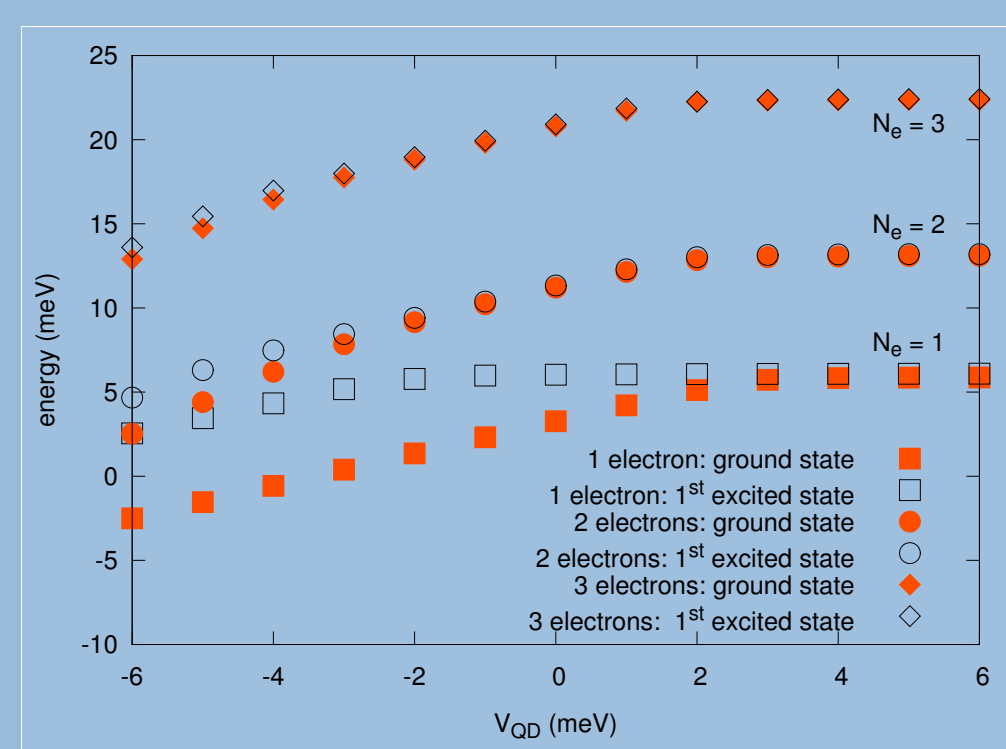
PARAMETRY MIKROSKOPOWE



Ewolucja wybranych parametrów mikroskopowych: hubbardowskie odpychanie $U_i \equiv V_{iiii}$ międzystanowe odpychanie $K_{ij} \equiv V_{ijij}$, całka wymiany $J_{ij} \equiv V_{ijji}$, i wielostanowe parametry V_{ijkl} .

Wszystkie całki (przy $M = 10$ jednocząstkowych funkcji falowych 10000) liczone są metodą Monte Carlo przy zastosowaniu biblioteki CUBA [4], z dokładnością 0.005 meV. Gwałtowne zmiany wartości parametrów mikroskopowych w okolicach $V_{QD} = -2 \text{ meV}$ i $V_{QD} = 3 \text{ meV}$ są skorelowane z przecinaniem się i odpychaniem jednocząstkowych poziomów energetycznych.

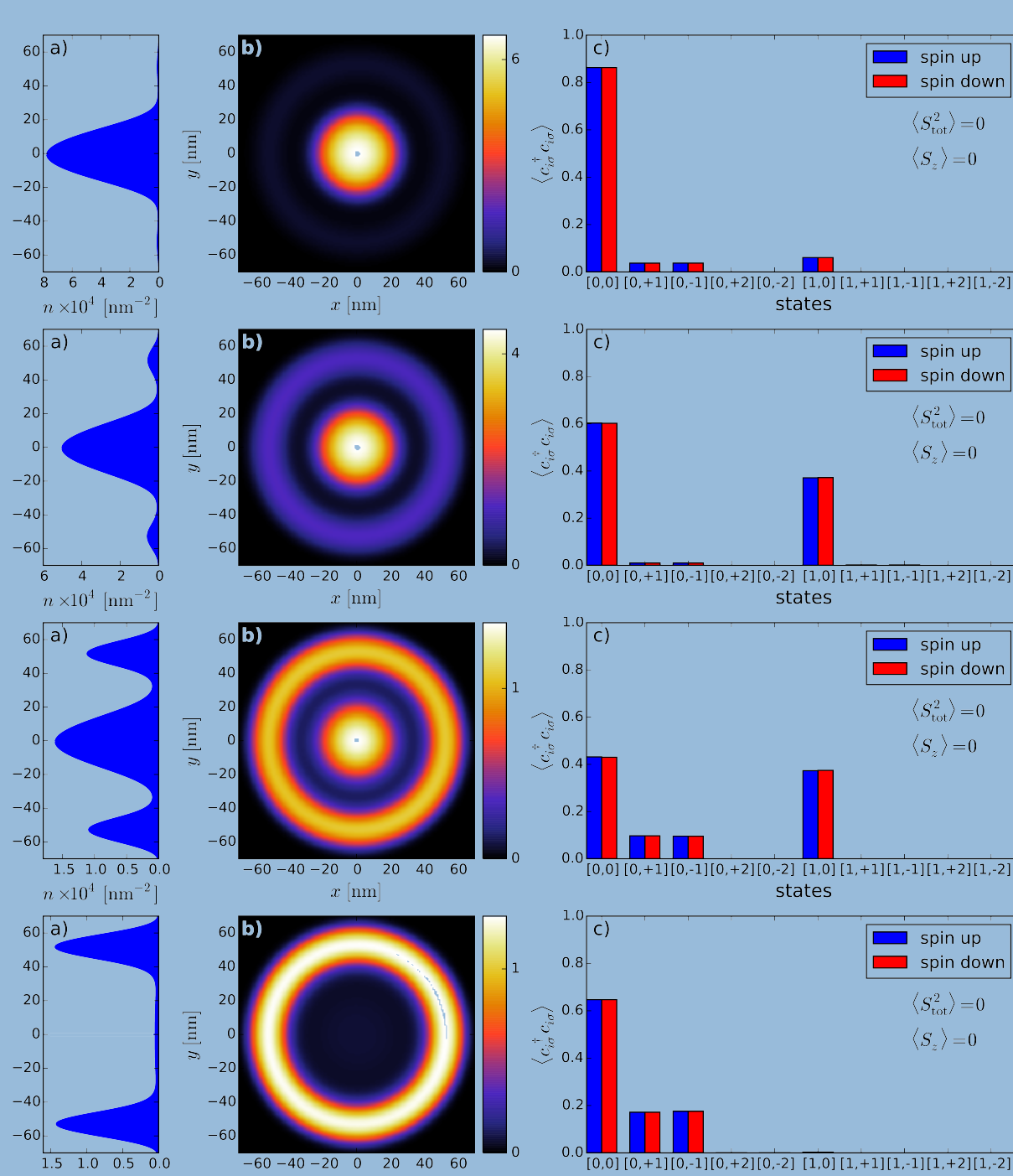
WYNIKI: 2 I 3 ELEKTRONY



Energia stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego dla $N_e = 1, 2, 3$.

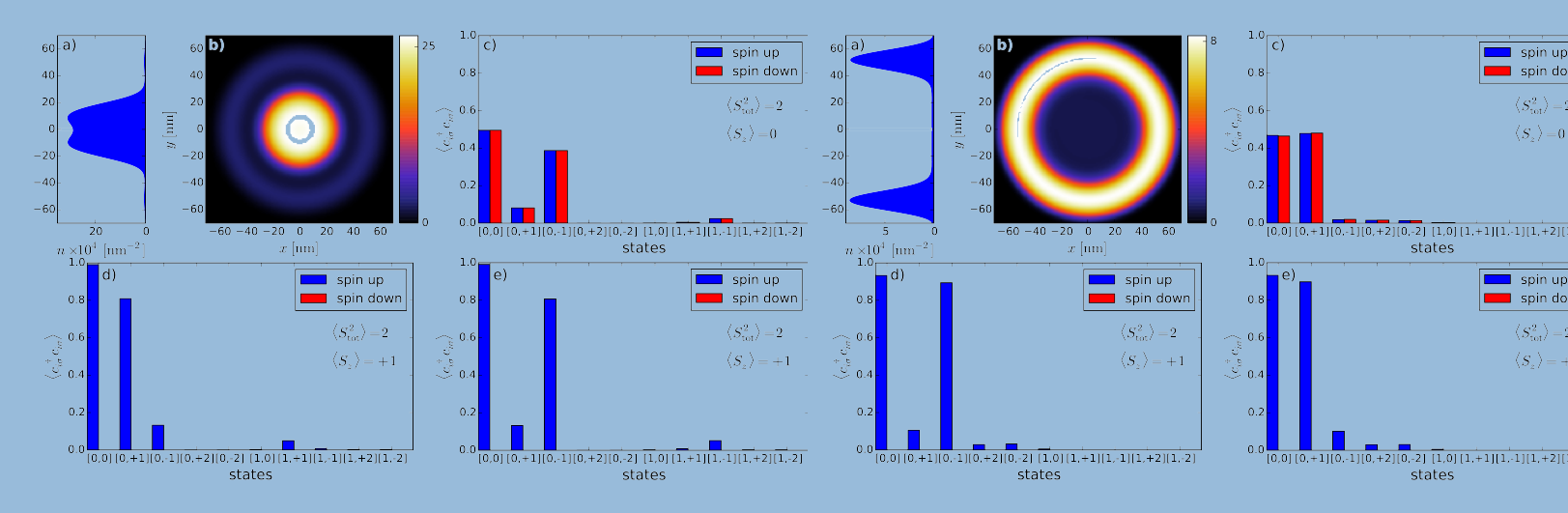
2 elektrony

Możemy zaobserwować ewolucję układu wieloelektronowego ze stanu, gdzie elektrony znajdują się w kropce kwantowej, do stanu gdzie znajdują się w pierścieniu.



Profile gęstości (a, b) i obsadzenia poszczególnych stanów (c) dla $V_{QD} = -4 \text{ meV}, -2 \text{ meV}, 2 \text{ meV}, 4 \text{ meV}$

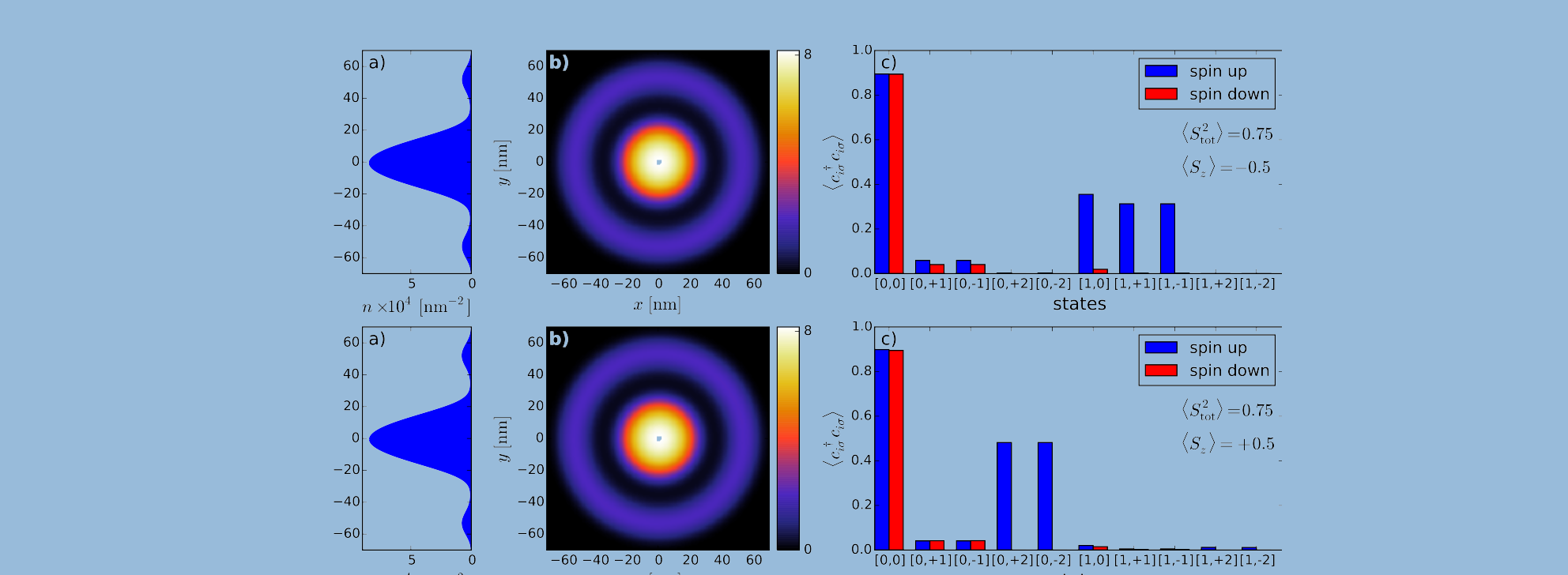
Podobną ewolucję można zaobserwować dla pierwszego stanu wzbudzonego.



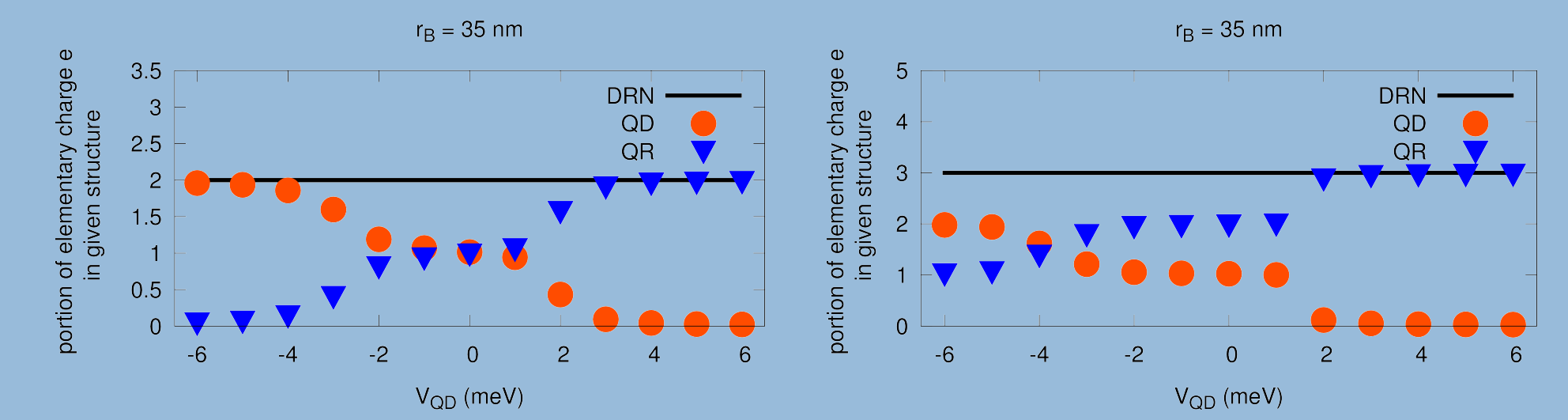
Profile gęstości (a, b) i obsadzenia poszczególnych stanów (c) dla $V_{QD} = -6 \text{ meV}, 4 \text{ meV}$

3 elektrony

W przypadku trzech elektronów układ podobnie ewoluuje z sytuacji, gdzie dwa elektrony są w kropce, a jedna w pierścieniu, do stanu gdzie wszystkie elektrony znajdują się w pierścieniu.



Profile gęstości (a, b) i obsadzenia poszczególnych stanów (c) dla $V_{QD} = -6 \text{ meV}$



Część ładunku znajdująca się w kropce (QD) i pierścieniu (QR) w funkcji potencjału kropki V_{QD} dla 2 (L) i 3 (P) elektronów.

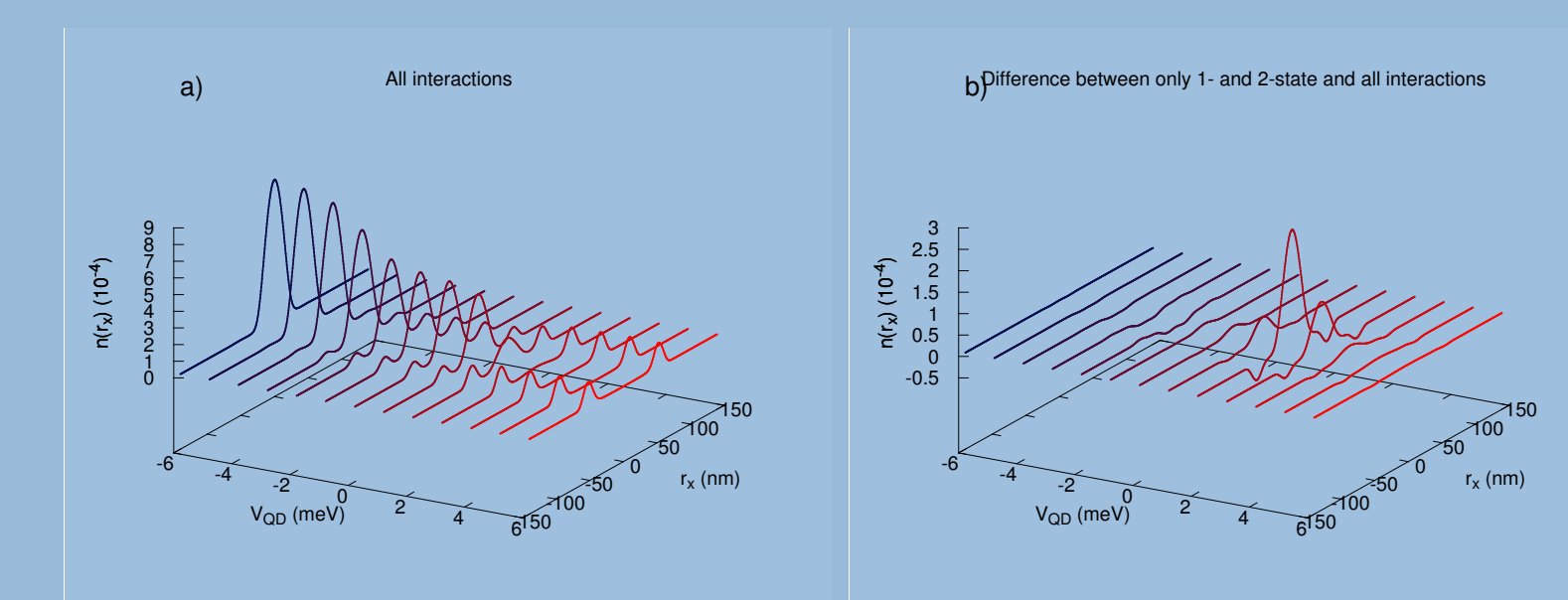
DEGENERACJA

Stopnie degeneracji dla różnych potencjałów QD, dla $N_e = 2, 3$.

V_{QD} (meV)	2 elektrony				3 elektrony			
	stan podstawowy deg.	S_{tot}	stan wzbudzony deg.	S_{tot}	stan podstawowy deg.	S_{tot}	stan wzbudzony deg.	S_{tot}
-6	1	0	3×2	1	2×3	$1/2$	2×2	$1/2$
-5	1	0	3×2	1	2×3	$1/2$	2×2	$1/2$
-4	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
-3	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
-2	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
-1	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
0	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
1	1	0	3	1	2×3	$1/2$	4×2	$3/2$
2	1	0	3×2	1	4	$3/2$	2×2	$1/2$
3	1	0	3×2	1	4	$3/2$	2×2	$1/2$
4	1	0	3×2	1	4	$3/2$	2×2	$1/2$
5	1	0	3×2	1	4	$3/2$	2×2	$1/2$
6	1	0	3×2	1	4	$3/2$	2×2	$1/2$

WPLYW PARAMETRÓW WIELOSTANOWYCH

W zaprezentowanej metodzie możemy dowolnie włączać i wyłączać wybrane oddziaływania, stąd możliwa jest analiza wpływu oddziaływań trój- i czterostanowych na rozwiązanie.



Ewolucja profilu gęstości elektronowej w funkcji potencjału kropki V_{QD} (L) i różnica w profilach gęstości w momencie wyłączenia oddziaływań trój- i czterostanowych (P).

ACKNOWLEDGMENTS

APK, AB i JS byli wspierani przez projekt MAESTRO z Narodowego Centrum Nauki (NCN), grant nr DEC-2012/04/A/ST3/00342, a AG-G, EZ i MMM przez grant nr DEC-2013/11/B/ST3/00824.

BIBLIOGRAFIA

- [1] E. Zipper, M. Kurpas, M.M. Maśka, New J. Phys. **14**, 093029 (2012).
 [2] M. Kurpas, B. Kędzierska, I. Janus-Zygmunt, A. Gorczyca-Goraj, E. Wach, E. Zipper, M.M. Maśka, J. Phys.: Condens. Matter **27**, 265801 (2015).
 [3] A. Biborski, A. P. Kądziaława, and J. Spałek, Comp. Phys. Commun. **197**, 7 (2015).
 [4] T. Hahn, Comp. Phys. Commun. **176**, 712 (2007).
 [5] A. Biborski, A. P. Kądziaława, A. Gorczyca-Goraj, E. Zipper, M. M. Maśka, J. Spałek, w przygotowaniu (2016).