

РАСЧЕТ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В ЭЛЕКТРИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

М. С. Максимов

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовые точки, индуцированные электрическим полем являются основным элементом современных наноэлектронных структур [1]. Поэтому для создания эффективных приборов на основе таких элементов требуется более глубокое понимание их энергетической структуры. Геометрические параметры удерживающего потенциала зависят от геометрии электродов, его создающих. Поскольку имеют место технологические ограничения на форму и расположение электродов, то для решения задачи расчета энергетического спектра необходимо применение различных численных методов. Данная работа посвящена теоретическому исследованию двухэлектронной электрически индуцированной квантовой точки. Для исследования основного состояния двухэлектронной системы применяются как вариационный метод, так и метод Хартри-Фока.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматриваются две области $z > 0, z < 0$, заполненные веществами с диэлектрическими проницаемостями ϵ_u, ϵ_d , соответственно. На границе между областями расположен дискообразный затвор, потенциал которого постоянен и равен Φ_0 . В области $z > 0$ находятся два электрона, на которые действует заданный внешний потенциал, также электроны не могут проникать в область $z < 0$ (рис. 1). Энергетический спектр такой системы описывается следующим уравнением Шредингера:

$$(T_1 + T_2 + V_1 + V_2 + V_{ee} + V_{ei})\Psi = E\Psi, \quad \rho_i \geq 0, z_i \geq 0, \theta_i \in [0, 2\pi], \quad i = 1, 2, \quad (1)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_i} \right|_{\rho_i=0} = 0, \quad \Psi|_{z_i=0} = 0, \quad \Psi \xrightarrow{\rho_i \rightarrow \infty} 0, \quad \Psi \xrightarrow{z_i \rightarrow \infty} 0, \quad (2)$$

где $(\rho_i, \theta_i, z_i) = \mathbf{r}_i$ — координаты i -того электрона, T_i — оператор кинетической энергии, V_i — потенциал внешнего поля, создаваемого дискообразным затвором диаметра d и изображением электрона, V_{ee} — оператор, описывающий межэлектронное взаимодействие, а V_{ei} — оператор, описывающий взаимодействие электрона с изображением другого электрона. Если в качестве единиц измерения для расстояния использовался эффективный Борковский радиус $a_B^* = \hbar^2 \varepsilon_u / m^* e^2$, для энергии — эффективная энергия Хартри $E_h^* = \hbar^2 / m^* a_B^{*2}$, то входящие в уравнение (1) операторы примут следующий вид:

$$T_i = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right). \quad (3)$$

$$V_i = -2 \frac{\Phi_0}{\pi} \arctan \left(\frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{\rho_i^2 + z_i^2 - d^2/4 + \sqrt{(\rho_i^2 + z_i^2 - d^2/4)^2 + d^2 z_i^2}}} \right) + \frac{Q}{4z_i}, \quad (4)$$

$$V_{ee} = \frac{1}{\|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\|} = \frac{1}{r_{12}}, \quad V_{ei} = \frac{Q}{\|\mathbf{r}_1 - (\rho_2, -z_2, \theta_2)\|} = \frac{Q}{\tilde{r}_{12}}. \quad (5)$$

где $Q = (\varepsilon_u - \varepsilon_d) / (\varepsilon_u + \varepsilon_d)$.

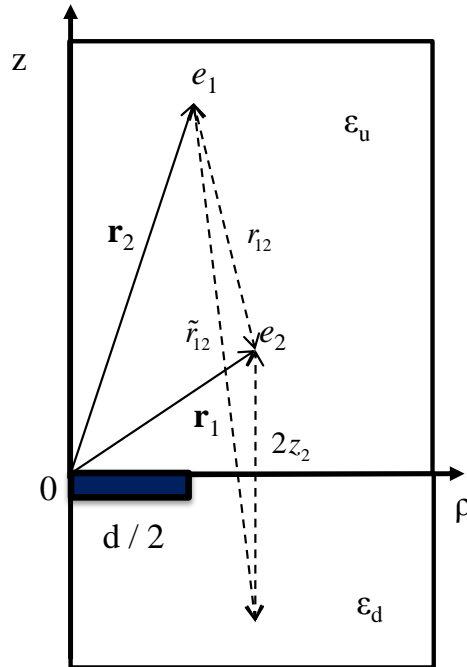


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемой системы.

3. РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДОМ ХАРТРИ-ФОКА

В методе Хартри-Фока искомая функция выбирается в виде $\Psi_{HF} = P(\rho_1, z_1)P(\rho_2, z_2)$. С использованием вариационного принципа [6] получаем для определения каждого из сомножителей Ψ_{HF} одноэлектронное уравнение Шредингера:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial P}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} - 2(V + Y + \tilde{Y})P = \lambda P \quad (6)$$

где $Y(\rho, z), \tilde{Y}(\rho, z)$ — самосогласованные потенциалы, определяемые следующими уравнениями:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial Y}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} = -2P^2, \quad \tilde{Y}(\rho, z) = Y(\rho, -z). \quad (7)$$

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad Y \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0, \quad Y \xrightarrow{z \rightarrow \infty} 0. \quad (8)$$

Граничные условия для уравнения (6) соответствуют условиям (2).

Решения задач (6), (7)-(8) ищались на конечных областях $\Omega = [0, L_\rho] \times [0, L_z]$, $\Omega_Y = [0, L_\rho] \times [-L_z, L_z]$ при $L_\rho = 15, L_z = 15$ в случае $\Phi_0 \leq 2$ и $L_\rho = 10, L_z = 15$ в остальных случаях. Для уравнения Шредингера были применены метод конечных объемов и метод конечных элементов. Для решения уравнения Пуассона использовался метод, описанный с некоторыми изменениями в [5].

Итоговая энергия E_{HF} находится из равенства $E_{HF} = -\lambda - \int \rho Y P^2 d\rho dz - Q \int \rho \tilde{Y} P^2 d\rho dz$.

Решение задачи (6), (7)-(8) находилось с помощью последовательного вычисления функций $P^{k+1}(Y^k), Y^{k+1}(P^{k-1} + P^k)$, где сумма $P^{k-1} + P^k$ является нормализованной: $\int \rho (P^{k-1} + P^k)^2 d\rho dz = 1$.

3.1. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

Решение задачи (6), (2) строилось на сетке, заданной разбиениями $\rho_i, z_j, i=0..N-1, j=0..M-1$.

Метод конечных элементов был реализован с использованием произведений одномерных кусочно-линейных функций. Порядок сходимости собственных значений в таком случае $O(h^2)$ [7].

В методе конечных объемов разобьем сетку на прямоугольники $K_{i,j}$, центрами которых являются точки (ρ_i, z_j) , после чего проинтегрируем уравнение (6) по произвольной области $K_{i,j}$. В итоге получим уравнение

$$\int_{\partial K} \rho(\nabla P, \mathbf{n}) d\rho dz - 2 \int_K \rho(V + Y + Q\tilde{Y}) P d\rho dz = \lambda \int_K \rho P d\rho dz. \quad (9)$$

Теперь заменим на каждой области $[\rho_i, \rho_{i+1}] \times [z_i, z_{i+1}]$ P на произведение линейных интерполянтов $R_i(\rho)Z_j(z)$ от узлов $P_{i,j}, P_{i+1,j}, P_{i,j+1}, P_{i+1,j+1}$.

Ошибка локальных аппроксимаций при выборе таких функций – $O(h^2)$.

Разбиения для обоих методов генерировались с помощью одномерного метода эквираспределения [3], примененного к управляющим функциям $P_z(z) = k_z \int |P(\rho, z)| d\rho + 1$, $P_\rho(\rho) = k_\rho \int |P(\rho, z)| dz + 1$ при $k_z = 100, k_\rho = 10$. Использованное при расчетах количество узлов по направлению ρ – 200, z – 400.

Также, часть погрешности в расчетах обусловлена ограниченной областью, что оказывает наибольший эффект при малых значениях потенциала, когда дисперсия решения увеличивается.

3.2. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

Решение задачи (7)-(8) также строится на сетке, заданной разбиениями $\rho_i, z_j, i=0..N-1, j=-M..M-1$.

Используя преобразование Фурье по переменной z к задаче (7)-(8) получим

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \hat{Y}}{\partial \rho} \right) - \kappa^2 \hat{Y} = -2\hat{P}^2, \quad (10)$$

$$\left. \frac{\partial \hat{Y}}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0, \quad \hat{Y} \xrightarrow{\rho=\infty} 0. \quad (11)$$

В случае равномерной сетки по z с использованием формулы левых прямоугольников для аппроксимации можно использовать быстрое преобразование Фурье. В случае же неравномерной сетки преобразование правой части аппроксимируется с помощью формулы трапеций и осуществляется с помощью матричного умножения. В области частот узлы распределяются с использованием квадратурных формул Гаусса-трапеций [4] с учетом логарифмической особенности решения (10)-(11) при $\kappa \rightarrow 0$. Решение задачи (10)-(11) осуществляется с помощью функции Грина следующим образом:

$$\hat{Y}(\rho, \kappa) = -K_0(\kappa\rho) \int_0^\rho s I_0(\kappa s) f(s) ds - I_0(\kappa\rho) \int_\rho^{L_\rho} s K_0(\kappa s) f(s) ds, \quad (12)$$

где $f(s) = -2\hat{P}^2$ и $I_0(x)$, $K_0(x)$ – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода, соответственно. Интегралы (12) аппроксимировались с квадратичным интерполянтном. В таком случае метод имеет спектральную точность по z и четвертый порядок точности по ρ .

4. РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

При расчетах энергии системы электронов вариационным методом использовались пробные функции вида

$$\Psi_{UHF} = P_1(\rho_1, z_1) P_2(\rho_2, z_2) + P_2(\rho_1, z_1) P_1(\rho_2, z_2) \quad (13)$$

$$P_i(\rho, z) = z \exp(-\lambda_i \rho^2 - \beta_i z^2), \quad i = 1, 2. \quad (14)$$

$$\Psi_{RHF} = P(\rho_1, z_1) P(\rho_2, z_2) \quad (15)$$

$$P(\rho, z) = z \exp(-\lambda \rho^2 - \beta z^2) \quad (16)$$

Пробная функция (13)-(14) является функцией типа неограниченного Хартри-Фока. Эта пробная функция далее сравнивается с функцией Хартри-Фока (15)-(16) и методом Хартри-Фока. Электронные орбитали P_i такого типа были предложены ранее в [2]. Такое сравнение позволяют оценить важность введения различных орбиталей, а также точность по-

добранных орбиталей. Энергии, полученные с помощью Ψ_{UHF}, Ψ_{RHF} , обозначим E_{UHF}, E_{RHF} , соответственно.

При использовании пробных функций (13)-(16) вычисление энергии сводится к расчету нескольких двумерных интегралов

$$a(l, m) = \int_{\Omega} \rho P_l P_m d\rho dz, \quad b(l, m) = 2 \int_{\Omega} \rho P_l V P_m d\rho dz, \quad b(l, m) = \int_{\Omega} \rho (\nabla P_l, \nabla P_m) d\rho dz, \quad (18)$$

а также нескольких многомерных

$$E_{Y_1} = \int_{\Omega} \frac{P_2(r_2) P_2(r_2) P_1(r_1) P_1(r_1)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad E_{Y_2} = \int_{\Omega} \frac{P_1(r_2) P_2(r_2) P_1(r_1) P_2(r_1)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad (19)$$

$$E_{\tilde{Y}_1} = \int_{\Omega} \frac{P_2(r_2) P_2(r_2) P_1(r_1) P_1(r_1)}{\tilde{r}_{12}} d\tau_1 d\tau_2, \quad E_{\tilde{Y}_2} = \int_{\Omega} \frac{P_1(r_2) P_2(r_2) P_1(r_1) P_2(r_1)}{\tilde{r}_{12}} d\tau_1 d\tau_2. \quad (20)$$

Для скорости расчетов одномерных интегралов были использованы формулы Гаусса-трапеций [4], которые позволяют обойти сложности на границах интегрирования.

Многомерные интегралы рассчитывались с помощью использования решения уравнения Пуассона [5], кратко описанного выше и последующим двумерным интегрированием.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 приведены зависимости энергий основного состояния двух-электронной системы от потенциала на затворе при различных параметрах задачи, рассчитанные методом Хартри-Фока с использованием метода конечных элементов. Диэлектрическая проницаемость полупроводника $\varepsilon_u = 11.4$. Для значений $Q = -0.5$, $Q = 0$, $Q = 0.5$, диэлектрическая проницаемость внешней области равняется $\varepsilon_d = 34.2$, $\varepsilon_d = 11.4$, $\varepsilon_d = 3.8$.

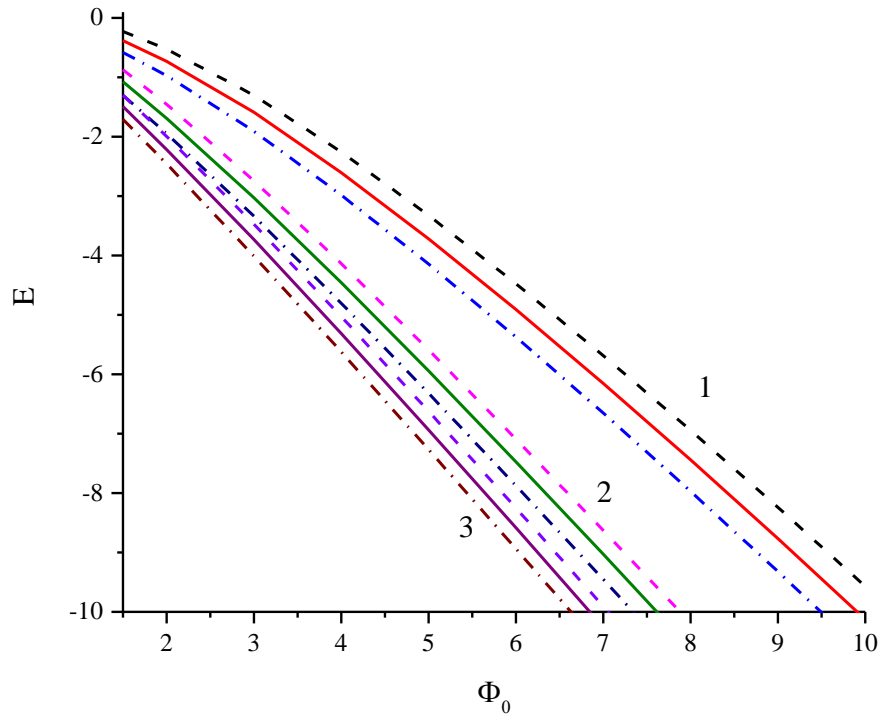


Рис. 2. Зависимость энергии основного состояния от параметров задачи: кривые с номерами 1, 2, 3 отвечают за $d = 4, d = 8, d = 12$, соответственно. Сплошные кривые отвечают за случай $Q = 0$, штрихованные за $Q = 0.5$, штрихпунктирные за $Q = -0.5$

На рис. 3 можно увидеть влияние межэлектронного взаимодействия на энергию основного состояния.

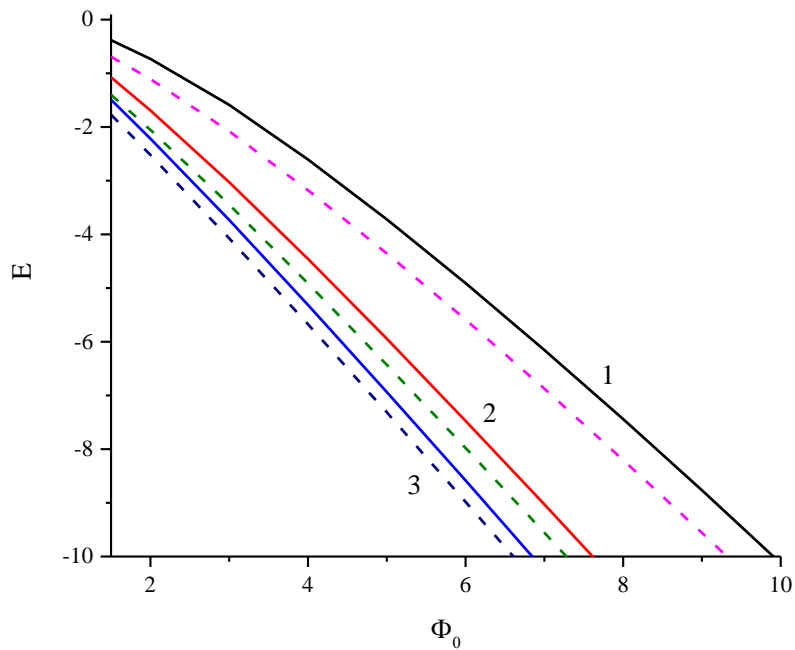


Рис. 3. Зависимость энергии основного состояния от параметров задачи при $Q = 0$: кривые с номерами 1, 2, 3 отвечают за $d = 4, d = 8, d = 12$. Штрихованные (сплошные) кривые отвечают за решение без учета (с учетом) межэлектронного взаимодействия.

На рис. 4 приведена сходимость МКЭ и МКО при некоторых параметрах задачи в зависимости от количества узлов. Из численных расчетов видно, что сходимость имеет первый порядок для больших значений потенциала на затворе.

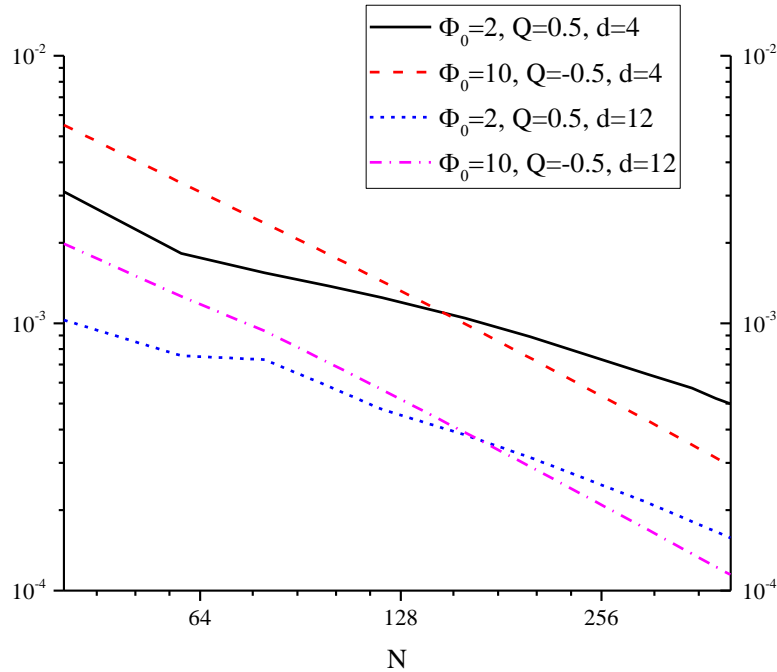


Рис. 4. Относительная разность энергий $\frac{|E_N^{\text{МКЭ}} - E_N^{\text{МКО}}|}{E_{400}^{\text{МКЭ}}}$, полученных с помощью МКО и МКЭ при различных параметрах задачи в зависимости от количества узлов: N для z и $N/2$ для ρ .

При достижении определенных значений Φ_0 , в зависимости от диаметра затвора и диэлектрической проницаемости, итерационный процесс, возникающий при решении уравнений Хартри-Фока не сходится. Скорее всего, это происходит из-за того, что потенциала на затворе не хватает для того, чтобы «удержать» оба электрона на одинаковых орбиталях. На рис. 5 видно, что при использовании одинаковых орбиталей погрешность сильно возрастает при малых значениях потенциала, больше всего для случая, когда разность диэлектрических проницаемостей вызывает отталкивание электрона от стенки. Однако при использовании различных орбиталей такого же вида в случае с малым значением потенциала и отталкивающей стенкой результаты вариационного метода лучше, чем у метода Хартри-Фока. При больших значениях потенциала отклонения обоих вариационных методов достаточно близки.

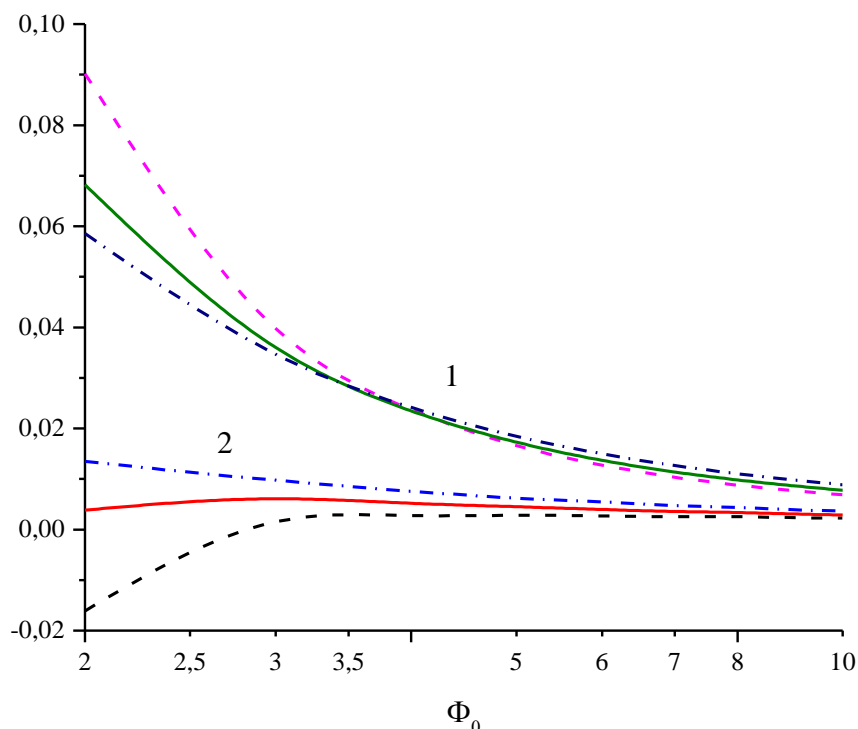


Рис. 5. Относительная разность энергий вариационных методов и метода Хартри-Фока при $d = 4$ с одинаковыми орбиталями $\frac{E_{RHF} - E_{HF}}{E_{HF}}$ (1) и различными $\frac{E_{UHF} - E_{HF}}{E_{HF}}$ (2). Сплошные кривые отвечают за случай $Q = 0$, штрихованные за $Q = 0.5$, штрихпунктирные за $Q = -0.5$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено численное моделирование влияния электрического поля, создаваемого дискообразным затвором, на основное состояние двухэлектронной системы. Приведено сравнение различных пробных функций с результатами метода Хартри-Фока, что позволяет оценить качество подобранных пробных функций и влияние межэлектронного взаимодействия на энергию основного состояния.

Результаты расчетов могут быть использованы при оценке возможности создания наноприборов, использующих дискообразный металлический затвор.

Литература

1. Reimann S. M., Manninen M. Electronic structure of quantum dots //Reviews of Modern Physics. – 2002. – Vol. 74. – №. 4. – P. 1283.
2. Levchuk E. A., Makarenko L. F. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate //Semiconductors. – 2016. – Vol. 50. – №. 1. – P. 89-96.

3. Хакимзянов Г. С., Шокина Н. Ю. Метод эквираспределения для построения адаптивных сеток //Вычислительные технологии. – 1998. – Т. 3. – №. 6.
4. Alpert B. K. Hybrid Gauss-trapezoidal quadrature rules/B. K. Alpert //SIAM Journal on Scientific Computing. – 1999. – Vol. 20. – №. 5. – P. 1551-1584.
5. Pataki A., Fast elliptic solvers in cylindrical coordinates and the Coulomb collision operator/ A. Pataki, L. Greengard //Journal of Computational Physics. – 2011. – Vol. 230. – №. 21. – P. 7840-7852.
6. Хартри Д. Расчеты атомных структур / Д. Хартри. – Москва : Издательство иностранной литературы, 1960. – 230 с.
7. Стренг, Г. Теория метода конечных элементов / Г. Стренг, Дж. Фикс. – М.: Издательство «Мир», 1977. – 349 с.