

AGH

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Praca magisterska

Michał Nowak

kierunek studiów: fizyka techniczna

specjalność: fizyka komputerowa

Sprężenie molekularne dla pary elektronów w stosie samozorganizowanych kropek kwantowych

Opiekun: dr hab. inż Bartłomiej Szafran

Kraków, czerwiec 2008

Oświadczam, świadomy odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę dyplomową wykonałem osobiście i samodzielnie i nie korzystałem ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

Kraków, 09 czerwca 2008

**Tematyka pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej Michała Nowaka,
studenta V roku studiów kierunku fizyka techniczna, specjalności fizyka
komputerowa**

Temat pracy magisterskiej: **Sprzężenie molekularne dla pary elektronów w
stosie samozorganizowanych kropek kwantowych.**

Opiekun pracy: dr hab. inż. Bartłomiej Szafran

Recenzenci pracy: dr inż. Tomasz Chwiej

Miejsce praktyki dyplomowej: WFiIS AGH, Kraków

Program pracy magisterskiej i praktyki dyplomowej

1. Omówienie realizacji pracy magisterskiej z opiekunem.
2. Zebranie i opracowanie literatury dotyczącej tematu pracy.
3. Praktyka dyplomowa:
 - zapoznanie się z tematyką samozorganizowanych kropek kwantowych, ideą problemu,
 - przygotowanie oprogramowania służącego symulacji problemu poruszanego w pracy,
 - zebranie, dyskusja i analiza wyników,
 - sporządzenie sprawozdania z praktyki.
4. Kontynuacja obliczeń związanych z tematem pracy magisterskiej.
5. Zebranie i opracowanie wyników obliczeń.
6. Analiza wyników obliczeń numerycznych, ich omówienie i zatwierdzenie przez opiekuna.
7. Opracowanie redakcyjne pracy.

Termin oddania w dziekanacie: 16 czerwca 2008

.....
(podpis kierownika zakładu)

.....
(podpis opiekuna)

Merytoryczna ocena pracy przez opiekuna:

Pan Michał Nowak w swojej pracy magisterskiej rozważał parę elektronów w stosie dwóch i trzech samozorganizowanych kropek kwantowych.

Do stosu przyłożone zostało pole elektryczne i badane były najniższe stany trypletowe i singletowe. Praca wskazuje możliwość uzyskania gigantycznego oddziaływania wymiany w układzie z możliwością jego włączania i wyłączania przez pole. Konkluzja ta może być przydatna dla prac nad spinową bramką logiczną. Z tego powodu wyniki pracy zasługują na publikację w międzynarodowym czasopiśmie naukowym. Magistrant przygotował już publikację - jest ona załączona na końcu pracy. Magistrant wykazał się dużą sprawnością, konsekwencją i krytycznym spojrzeniem na własne wyniki. Do pracy wybrał tylko drobną część wyprodukowanych krzywych. Wyniki uzyskał przy pomocy programu, który opracował samodzielnie. Posiadałem program do podobnego problemu: dla pary elektron-dziura w stosie. Problem dwóch elektronów wymagał nieco innego podejścia. Pan Michał Nowak wolał stworzyć całkowicie własną implementację niż przerabiać moją. Zadanie było trudne gdyż badane były układy trójwymiarowe, bez żadnej zakładanej symetrii. Zostało wykonane znakomicie.

Pan Michał Nowak odbył dwutygodniowy staż naukowy na Uniwersytecie w Antwerpii, gdzie został bardzo dobrze przyjęty i gdzie zaproponowano mu robienie doktoratu z teorii nanostruktur półprzewodnikowych. Moim zdaniem swoje zadanie jako magistrant Pan Michał Nowak wypełnił wyjątkowo dobrze, dlatego uważam, że praca zasługuje na ocenę celującą.

Końcowa ocena pracy przez opiekuna:

Data:

Podpis:

Merytoryczna ocena pracy przez recenzenta:

W pracy magisterskiej Pan Michał Nowak analizuje aspekty kontroli energii wymiany w układzie dwuelektronowym w stosie dwóch i trzech kropek kwantowych przy użyciu zewnętrznego pola elektrycznego. Wybór tego typu układu jest nieprzypadkowy. Dotychczasowe badania dwukubitowych bramek kwantowych skupiały się głównie na sterowanych elektrostatycznie bocznie sprzężonych kropkach kwantowych, pozwalających na wykonywanie operacji na spinach elektronów. Jednak jak sam autor pracy zauważa, zakres sterowania energią wymiany w takich układach jest niewielki. Ze względu na małą wartość energii wymiany, czas wykonywanych operacji kwantowych jest porównywalny z czasem procesów dekoherencyjnych zakłócających pracę bramki kwantowej. W tym kontekście zachodzi potrzeba poszukiwania dwukubitowych układów zbudowanych na sprzężonych kropkach kwantowych o innej geometrii, w których energia wymiany byłaby większa. Niniejsza praca wychodzi tym oczekiwaniom naprzeciw. Ma ona charakter czysto teoretyczny. Należy w tym miejscu podkreślić fakt, że wszystkie obliczenia kwantowe zostały wykonane dokładnie bez stosowania przybliżeń. Aby uwzględnić pełną korelację elektronową autor zastosował metodę Mieszania Konfiguracji co w praktyce jest dość trudne zwłaszcza dla studenta.

Główny nacisk w pracy został położony na przebadanie wpływu geometrii samego stosu kropek (symetria osiowa lub jej brak, głębokość potencjału uwięzienia poszczególnych kropek) oraz orientacji względem tego stosu zewnętrznego pola elektrycznego na strukturę poziomów energetycznych układu dwóch elektronów. Uzyskane przez magistranta wyniki są bardzo interesujące. W układzie dwóch identycznych kropek kwantowych autor przewiduje monotoniczny wzrost energii wymiany, gdy kierunek pola elektrycznego jest zgodny z osią stosu. Natomiast dla kropek różniących się geometrią potencjału uwięzienia, autor przewiduje możliwość modulacji wartości energii wymiany w zależności od wartości pola oraz wzajemnego kierunku wzrostu stosu i kierunku pola. Wyniki uzyskane dla stosu złożonego z trzech kropek w zakresie średniego sprzężenia tunelowego, sugerują możliwość uzyskania wzrostu energii wymiany poprzez zwiększanie głębokości potencjału uwięzienia środkowej kropki. Autor przewiduje też inny mechanizm pracy trójkropkowej dwukubitowej bramki kwantowej niż bramki zbudowanej z dwóch kropek. W bramce trójkropkowej maksimum energii osiągnane jest przy braku pola a jej minimum dla pewnej określonej dodatniej lub ujemnej wartości natężenia pola elektrycznego.

Na podstawie wyników uzyskanych przez Pana Michała Nowaka przygotowana już została publikacja (dołączona do pracy), która w najbliższym czasie zostanie opublikowana w czasopiśmie fizycznym. Praca nie budzi moich zastrzeżeń odnośnie przygotowania redakcyjnego. Uważam, że praca magisterska Pana Michała Nowaka zasługuje na ocenę celującą.

Końcowa ocena pracy przez recenzenta:

Data:

Podpis:

Skala ocen: (6.0 – celująca), 5.0 – bardzo dobra, 4.5 – plus dobra, 4.0 – dobra, 3.5 – plus dostateczna, 3.0 – dostateczna, 2.0 – niedostateczna

Serdecznie dziękuję Panu dr Bartłomiejowi Szafranowi za okazaną życzliwość, zrozumienie, wiele ciekawych pomysłów, oraz nieocenioną pomoc w realizacji pracy, dzięki której mogła ona przybrać ostateczną formę.

Spis treści

1	Wstęp	8
1.1	Cel i motywacja pracy	8
1.2	Samozorganizowane kropki kwantowe	11
2	Teoria	14
2.1	Potencjał uwięzienia	14
2.2	Obliczenia	15
3	Wyniki	18
3.1	Stany jednoelektronowe	18
3.2	Stany dwuelektronowe w przypadku braku pola elektrycznego	19
3.3	Energia wymiany dla pola elektrycznego zorientowanego pionowo dla identycznych, współosiowych kropek kwantowych	25
3.4	Energia wymiany dla pola elektrycznego zorientowanego pionowo – wpływ niewspółosiowego ułożenia i różnej głębokości kropek	29
3.5	Najniższy stan singletowy i trypletowy pod wpływem pola elektrycznego prostopadłego do osi wzrostu	31
3.6	Układ trzech kropek sprzężonych pionowo	35
3.7	Trzy pionowo ułożone kropki w przypadku kiedy środkowa kropka jest najgłębsza	36
4	Podsumowanie i wnioski	42

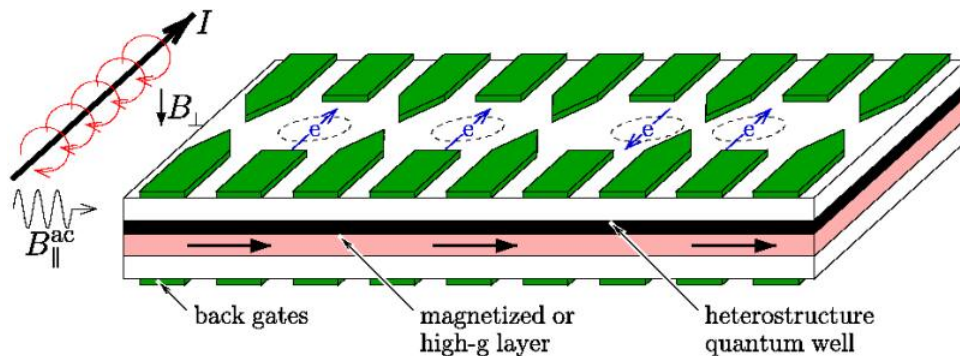
Załącznik: Publikacja – "Manipulation of two-electron states by the electric field in stacked self-assembled dots".

1 Wstęp

1.1 Cel i motywacja pracy

W dobie rodzącej się informatyki kwantowej jednym z układów, które mogą stać się podstawowym budulcem komputera kwantowego jest kwantowa bramka logiczna operująca na spinach elektronów. Aby zrealizować układ wykonujący kwantowe operacje logiczne za pomocą spinów dwóch elektronów w pierwszej kolejności wymagana jest możliwość sterowania sprzężeniem pary elektronów. Zagadnienie to w podejściu wykorzystującym samozorganizowane kropki kwantowe wraz z wynikami symulacji jest tematem niniejszej pracy.

Elektrony uwięzione w dwóch półprzewodnikowych kropkach kwantowych [2] tworzą orbitale, które w zależności od geometrii układu, grubości bariery pomiędzy kropkami, oraz przyłożonych zewnętrznych pól mogą obejmować obydwie kropki lub być zlokalizowane w jednej z nich. Te pierwsze są odpowiednikiem orbitali elektronowych powstających w kowalencyjnym wiązaniu molekularnym, a te drugie odpowiadają orbitalom w wiązaniu jonowym.



Rysunek 1: Schematyczny model kwantowej bramki logicznej operującej na spinach elektronów opisanej w pracy [1].

Teoria operacji na sprzężonych spinach [1, 3] bazuje na Hamiltonianie Heisenberga $H_s(t) = J(t)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$. Gdzie $J(t)$ jest energią wymiany, którą definiujemy jako różnicę pomiędzy energią najniższego trypletu, a energią najniższego singletu ($J = E_t - E_s$), a \mathbf{S}_1 oraz \mathbf{S}_2 są operatorami spinów obydwu elektronów. Hamiltonian Heisenberga jest niskoenergetycznym przybliżeniem, przyjmującym, że wyższe stany wzbudzone mają energię dużo większą niż najniższy stan singletowy i trypletowy. O odległościach między poziomami decyduje przede wszystkim rozmiar kropek. Dla kropek samozor-

ganizowanych jest on najmniejszy. Przybliżenie Heisenberga jest dla nich najlepiej usprawiedliwione.

Dwa elektrony oddziałujące zgodnie z Hamiltonianem Heisenberga wymieniają swoje spiny w czasie τ takim, że $\int_0^\tau dt J(t) = \hbar\pi$. W przypadku ogólnym, to jest poza zakresem stosowności przybliżenia Heisenberga, proces wymiany spinów staje się złożony [15], a czas wykonania operacji staje się trudny do przewidzenia.

Przy zaniedbaniu oddziaływania spin-orbita funkcję falową dwóch elektronów możemy zapisać w postaci rozdzielonej na część orbitalną χ i spinową S

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)S(\sigma_1, \sigma_2). \quad (1)$$

Ponieważ elektrony są fermionami ich funkcja falowa jest antysymetryczna względem zamiany cząstek

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \sigma_2, \sigma_1). \quad (2)$$

Antysymetryczność może być realizowana albo przez część spinową, albo przez część orbitalną. W przypadku kiedy jest realizowana przez część spinową, orbitalna część funkcji falowej układu jest symetryczna. Stan ten nazywamy stanem singletowym

$$\chi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \chi_S(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (3)$$

W przypadku kiedy orbitalna część jest antysymetryczna stan nazywamy trypletowym

$$\chi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\chi_T(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1). \quad (4)$$

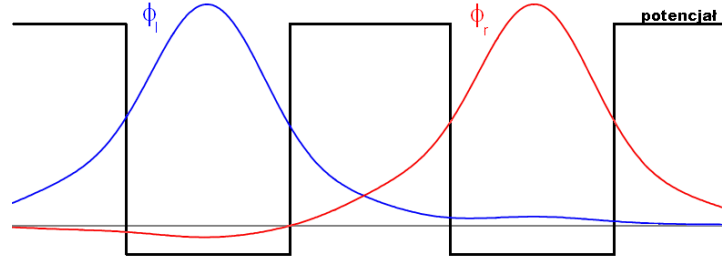
Pod nieobecność zewnętrznego pola magnetycznego energia najniższego singletu jest niższa lub równa energii najniższego trypletu [4, 5, 6, 7, 8]. Równość – a więc zerowa energia wymiany – następuje gdy elektrony zajmują rozdzielone przestrzennie lokacje.

Aby wyjaśnić związek znikającej energii wymiany z rozdzieleniem elektronów rozważmy układ dwóch studni potencjału w przypadku dużej odległości pomiędzy nimi. Przestrzenna funkcja falowa dwóch elektronów w takim układzie może zostać zapisana jako

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_l(r_1)\phi_r(r_2) \pm \phi_l(r_2)\phi_r(r_1)), \quad (5)$$

gdzie ϕ_l oraz ϕ_r są funkcjami związanymi z każdą z kropek (Rys. 2) a $+$ ($-$) odpowiada singletowi (trypletowi). Wartość oczekiwana Hamiltonianu dla funkcji falowej (5) wynosi

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = 2E_1 + \langle \phi_l(r_1)\phi_r(r_2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_l(r_1)\phi_r(r_2) \rangle \pm \langle \phi_l(r_1)\phi_r(r_2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_l(r_2)\phi_r(r_1) \rangle, \quad (6)$$



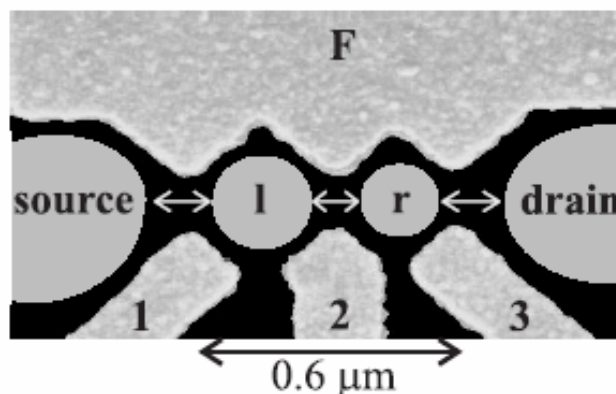
Rysunek 2: Schematyczny rysunek dwóch studni potencjału oraz funkcji falowych związanych z każdą z kropek. Szarą prostą zaznaczono poziom zerowy. Pokazane funkcje falowe są ortogonalne.

gdzie człon $\langle \phi_l(r_1)\phi_r(r_2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_l(r_2)\phi_r(r_1) \rangle$ odpowiada za energię wymiany. Jeśli jednoelektronowe funkcje falowe elektronów nie przekrywają się iloczyn $\phi_l(r_2)\phi_r(r_1)$ jest równy zero, a z nim zeruje się energia wymiany. Z tego powodu energia wymiany może być używana jako miara sprzężenia między kropkami. Energia wymiany jest wynikiem konkurencji pomiędzy sprzężeniem tunelowym, które przeciwdziała przestrzennej separacji elektronów, a sprzężeniem kulombowskim które jej sprzyja.

Schematyczny model kwantowej bramki logicznej opisanej w pracy [1] przedstawia Rys. 1. W przykładowym układzie obroty spinu uzyskiwane są dzięki oscylacjom Rabięgo, które indukowane są zewnętrznym promieniowaniem mikrofalowym. Dwukubitowe operacje przeprowadzane są przez kontrolowane sprzężenie pary elektronów sterowane wysokością bariery pomiędzy kropkami [3]. Najbardziej zaawansowanym kandydatem do implementacji spinowej bramki logicznej, jest system wielu kropek zrealizowanych na dwuwymiarowym gazie elektronów [11], w którym bariera pomiędzy kropkami, może być kontrolowana przez potencjał na elektrodach, pomiędzy kropkami.

Optymalny jest układ, w którym energia wymiany jest największa. Duża energia wymiany pozwala na przeprowadzenie maksymalnej liczby operacji spinowych w czasie krótszym od czasu dekoherencji. Planarne kropki kwantowe wykonane na bazie elektronów związanych w dwuwymiarowym gazie (2DEG) są stosunkowo duże. Elektrony w tych kropkach mają wystarczająco dużo przestrzeni aby zająć rozdzielone lokacje (krystalizują Wignerowsko), tak że energia wymiany będzie zerowa lub mała. Ładunek krystalizuje w postaci jednoelektronowych wysp czego skutkiem jest degeneracja singlet-tryplet[9]. Z tego powodu trudno jest silnie sprząć spiny elektronów w dużych kropkach.

W realistycznym modelu podwójnych kropek kwantowych oddzielonych barierą po-

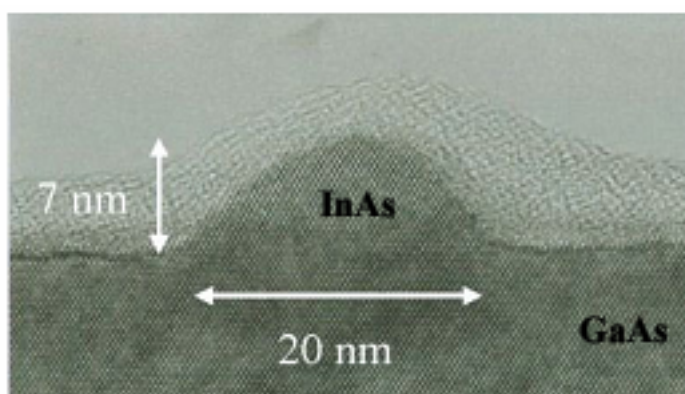


Rysunek 3: Para planarnych, elektrostatycznych kropek kwantowych [10].

tencjału energia wymiany jest rzędu 0.1 meV [12]. Optymalizacja energii wymiany w kropkach sprzężonych bocznie była przedmiotem wielu prac teoretycznych [6, 13, 14].

1.2 Samozorganizowane kropki kwantowe

Samozorganizowane kropki kwantowe powstają poprzez procedurę wzrostu Straskiego-Kastranova. Powstają gdy stała sieci krystalicznej materiału podłoża różni się od stałej sieci materiału osadzanego na podłożu. Po kilku warstwach krystalizujących ze stałą sieci podłoża, następuje desegregacja i powstają wyspy o regularnych kształtach (Rys. 4) i podobnych rozmiarach. Kształt i rozmiar wysp zależy od różnicy stałych sieci, temperatury w której następuje wzrost i szybkości wzrostu. Kropki spontanicznie tworzą stosy rosnąc jedna nad drugą.



Rysunek 4: Samozorganizowana kropka kwantowa InGaAs/GaAs wg. Fry i inni, Phys. Rev. Lett. **84**, 733 (2000).

W pracy tej rozważamy energię wymiany w dwóch oraz trzech kropkach kwantowych pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego. W układzie samozorganizowanych kropek kwantowych bariera pomiędzy kropkami ustalana jest podczas procesu wzrostu. Jednak, jak zostanie pokazane poniżej, istnieje możliwość sterowania oddziaływaniem wymiennym poprzez zewnętrzne pole elektryczne przyłożone równoległe do osi urządzenia. Energie wymiany jakie uzyskujemy poniżej są kilka rzędów wielkości większe od tych uzyskiwanych dla kropek sprzężonych bocznie. Samozorganizowane kropki są atrakcyjne pod kątem operacji na spinach również ze względu na duże odległości pomiędzy jednoelektronowymi poziomami energetycznymi, które są rzędu dziesiątków meV. Jest to korzyść, ponieważ obroty pojedynczych spinów przez promieniowanie mikrofalowe powinno pozostawić przestrzenne stany nienaruszone, bez wprowadzania domieszek stanów wzbudzonych.

Pionowo ułożone samozorganizowane kropki kwantowe w zewnętrznym polu elektrycznym są tematem wielu badań zarówno eksperymentalnych [16, 17] jak i teoretycznych [18, 19] prowadzonych w kontekście pomiarów fotoluminescencyjnych rekombinacji ekscytonów. Trójwymiarowy model sprzężonych kropek kwantowych oraz metoda mieszania konfiguracji dla diagonalizacji dwucząstkowego Hamiltonianu, która została wykorzystana w tej pracy była wcześniej wykorzystana [19] dla zbadania efektu Starka w podwójnych kropkach. W eksperymentach dotyczących fotoluminescencji linie spektralne układają się w charakterystyczny układ odpychań poziomów (antykrossingów), który z jednej strony wynika z hybrydyzacji orbitali jednoelektronowych, a z drugiej strony związany jest z przenoszeniem cząstek pomiędzy kropkami [19]. Zachowanie pary elektronów w zewnętrznym polu elektrycznym, które opisywane jest w tej pracy, może być także rozumiane jako wynikające z antykrossingów występującego osobno dla stanów singletowych i trypletowych. Zastosowany model ze względu na brak założonej symetrii pozwolił opisać system kropek niewspółosiowych oraz dla dowolnej orientacji pola elektrycznego. Przedstawione będą także wyniki dla układu trzech kropek kwantowych.

Oddziaływanie wymiany w pionowych konfiguracjach kropek kwantowych było badane poprzednio [20] dla struktur dwóch półprzewodnikowych studni kwantowych. W tych podwójnych kropkach kwantowych potencjał uwięzienia jest pochodzenia elektrostatycznego i ma niemalże paraboliczny kształt, który różni się od potencjału w kształcie studni znanego z samozorganizowanych kropek. Dla tego potencjału elektrostatycznego [20] pole elektryczne skierowane w płaszczyźnie kropki (które także jest rozważane w tej pracy) jest nieistotne dla niskoenergetycznej części widma gdyż przesuwa jedynie umiejscowienie minimum potencjału oscylatora harmonicznego. Co

więcej, w kropkach sprzężonych pionowo odległości pomiędzy jednoelektronowymi poziomami energetycznymi są rzędu 5 meV co jest wartością około 10 razy mniejszą niż dla systemu rozważanego w tej pracy. Duże odległości pomiędzy jednoelektronowymi poziomami energetycznymi, które otrzymujemy w samozorganizowanych kropkach kwantowych powodują, że zakaz Pauliego odgrywa dużo większą rolę niż w przypadku kropek sprzężonych pionowo z bocznym potencjałem elektrostatycznym lub w kropkach sprzężonych bocznie. Dla wszystkich struktur prawdopodobieństwo znalezienia dwóch elektronów w tej samej kropce jest większe dla stanu singletowego niż dla stanu trypletowego. Efekt ten można wykorzystać do optymalizacji (zwiększenia) energii wymiany wprowadzając asymetrię do układu dwóch kropek [6]. Dla samozorganizowanych kropek w stanie trypletowym jest niemal niemożliwe zajęcie tej samej kropki przez dwa elektrony, przynajmniej w zakresie pól elektrycznych rozważonych poniżej.

2 Teoria

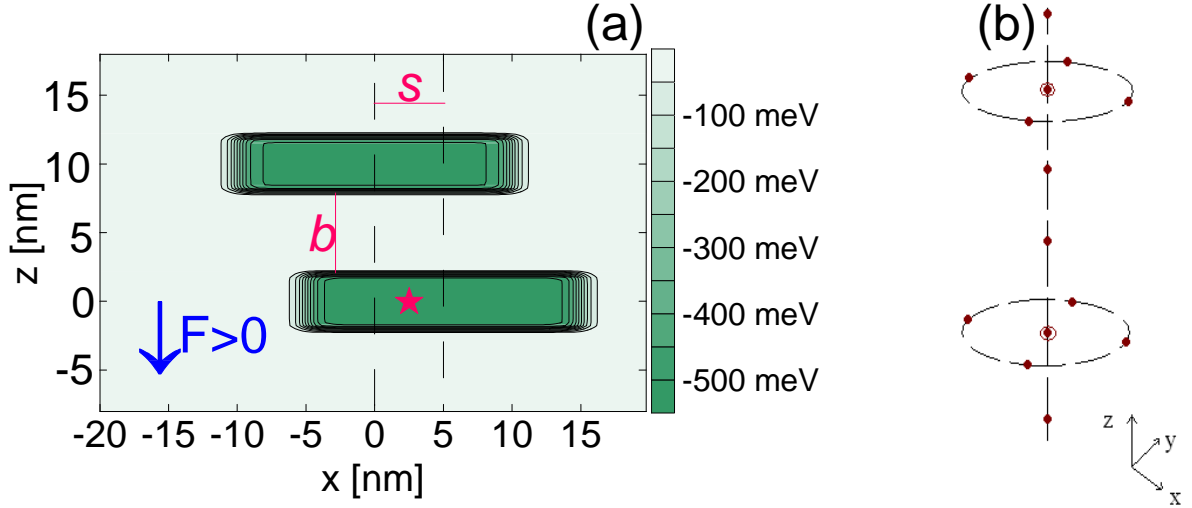
2.1 Potencjał uwięzienia

Potencjał uwięzienia dla pojedynczej kropki modelowany jest używając modelu cylindrycznej studni potencjału o głębokości V_0 , o promieniu R i wysokości $2Z$

$$W(\mathbf{r}; X, \zeta; V_0) = -V_0 / \left[\left(1 + \frac{(x - X)^2 + y^2}{R^2} \right)^{10} \left(1 + \frac{(z - \zeta)^2}{Z^2} \right)^{10} \right], \quad (7)$$

Środek kropki umiejscowiony jest w punkcie $x = X$, $y = 0$ i $Z = \zeta$. Geometryczne parametry pojedynczej kropki zaczerpnięte zostały z eksperymentalnej pracy [16], w której przeprowadzono manipulacje na elektronach i dziurach. Przyjmujemy więc średnicę kropki $2R = 20$ nm i wysokość $2Z = 4$ nm. Głębokość studni potencjału przyjęta została jako $V_0 = 508$ meV co odpowiada kropce kwantowej wykonanej z $\text{In}_{0.66}\text{Ga}_{0.34}\text{As}$ [19] w otoczeniu GaAs (przyjęto także masę efektywną elektronu jako $m = 0.037m_0$, stałą dielektryczną jako $\epsilon_0 = 12.5$). W kropce kwantowej o podanych parametrach pojedynczy elektron w stanie podstawowym posiada energię -255 meV, to jest 253 meV nad dnem studni. Pierwszy wzbudzony stan energetyczny w tym potencjale uwięzienia jest zdegenerowanym stanem p (moment orbitalny $\pm\hbar$) o energii -187 meV. Tak więc, energia podstawowego wzbudzenia w tym potencjale wynosi $\Delta E = 68$ meV (dla dwuwymiarowej nieskończonej studni potencjału o promieniu $R = 10$ nm uzyskano wzbudzenie o energii $\Delta E = 92$ meV). Odległości pomiędzy poziomami są dużo większe niż energia wymiany. Dla pojedynczej kropki energia wymiany dla dwóch elektronów w stanie podstawowym wynosi około 23 meV. Dla układu wielu kropek funkcje falowe dla oddziałujących elektronów są skonstruowane głównie z jednokropkowych funkcji falowych podstawowego poziomu energetycznego. Jednakże w niniejszej pracy dwuelektronowe stany własne diagonalizowane są w bazie, która zawiera nie tylko orbitale p , ale także orbitale d (baza zawiera 8 zlokalizowanych stanów na kropkę co opisano poniżej).

Potencjał uwięzienia dla układu kilku kropek kwantowych wzięty jest jako suma potencjałów jednokropkowych. Rys. 5 pokazuje przekrój potencjału uwięzienia dla $y = 0$ dla kropek kwantowych, których osie (przerywane pionowe linie) leżą w odległości $s = 5$ nm, z barierą pomiędzy kropkami o grubości $b = 6$ nm (centra kropek leżą od siebie w kierunku pionowym w odległości $2Z + b$). Przyjęto, że kropki są identycznego kształtu oraz wielkości. Zróżnicowanie potencjału uwięzienia osiągnęte jest poprzez zmianę głębokości kropek. Zmiana głębokości potencjału uwięzienia jest zawsze mała w porównaniu do głębokości kropki. Na przykład potencjał prezentowany na 5 został przyjęty jako suma $V(\mathbf{r}) = W(\mathbf{r}; 0, 10 \text{ nm}, V_0) + W(\mathbf{r}; 5 \text{ nm}, 0, V_0 + dV)$ z $dV = 20$



Rysunek 5: (a) Przekrój przez potencjał uwięzienia układu dwóch kropek kwantowych wykonany dla płaszczyzny $y = 0$. Przerywane pionowe linie pokazują centra kropek. Szerokość bariery pomiędzy kropkami wynosi $b = 6$ nm, przesunięcie pomiędzy osiami kropek wynosi $s = 5$ nm. Niższa kropka głębsza jest o 20 meV. Gwiazdka oznacza miejsce gdzie przyjęto zero potencjału elektrycznego. Strzałka wskazuje kierunek w jakim działa siła elektryczna na elektrony dla wartości pola $F > 0$. (b) Schematyczny rysunek rozmieszczenia pozycji centrów Gaussowskich w bazie wielocentrowej. Cztery centra rozmieszczone są na okręgu zlokalizowanym w płaszczyźnie w środku każdej kropki. Dwa centra zlokalizowane są w środku kropki, oraz jedno poniżej i powyżej centrum w osi dla każdej kropki.

meV (niższa kropka na rysunku przyjęta jest jako głębsza).

2.2 Obliczenia

Rozpatrujemy układ opisany poprzez równanie Schrödingera

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (8)$$

Hamiltonian ma następującą postać

$$H = h_1 + h_2 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\mathbf{r}_{12}|} + |e|\mathbf{F} \cdot (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_x), \quad (9)$$

gdzie \mathbf{F} jest wektorem pola elektrycznego, a \mathbf{r}_x jest punktem gdzie przyjmujemy zero potencjału elektrycznego, h_1 i h_2 są jednoelektronowymi operatorami energii, gdzie

$$h_{1(2)} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_{1(2)}^2 + V(\mathbf{r}_{1(2)}). \quad (10)$$

\mathbf{r}_x przyjmujemy w płaszczyźnie przecinającej centrum dolnej kropki w połowie odległości pomiędzy osiami kropek (czerwona gwiazda na Rys. 5). Problem własny operatora H rozwiązujemy korzystając z metody mieszania konfiguracji z wariacyjną funkcją falową utworzoną z symetryzowanych i antysymetryzowanych orbitali jednoelektronowych.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{ij} c_{ij} (1 \pm P_{12}) f_i(\mathbf{r}_1) f_j(\mathbf{r}_2), \quad (11)$$

gdzie f_i jest i -tą jednoelektronową funkcją falową, P_{12} jest operatorem zamiany cząstek. Znak "+"brany jest dla singletu (symetrycznej przestrzennej części funkcji falowej), a "-" dla trypletu (antysymetrycznej przestrzennej części funkcji falowej). Jednoelektronowe funkcje falowe uzyskano metodą diagonalizacji hamiltonianu h_1 w bazie funkcji gaussowskich

$$f_j(\mathbf{r}_p) = \sum_i d_i^{(j)} \exp \left[-\alpha_i \left((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right) - \beta_i (z - z_i)^2 \right], \quad (12)$$

gdzie $d_i^{(j)}$ są liniowymi parametrami wariacyjnymi dla j -tej funkcji falowej, α_i, β_i są nieliniowymi parametrami wariacyjnymi określającymi stopień lokalizacji i -tego gaussianu w punkcie (x_i, y_i, z_i) . Wykorzystano 8 centrów gaussowskich na kropkę [Rys. 5(b)]: dwa gaussiany zlokalizowane są w centrach kropek, cztery położone są na okręgach wokół osi kropki leżących w połowie jej głębokości. Dwa dodatkowe centra gaussowskie zlokalizowane są symetrycznie na osi kropki. Precyzyjne położenie centr, oraz parametry wariacyjne dotyczące ich lokalizacji uzyskiwane są metodą minimalizacji energii dla układu jednoelektronowego bez pola elektrycznego. Minimalizowana jest wartość oczekiwana energii układu. Zgodnie z twierdzeniem Rayleigh'a

$$\frac{\langle f(r) | h_1 | f(r) \rangle}{\langle f(r) | f(r) \rangle} \geq E_0. \quad (13)$$

Szukamy wartości minimum ilorazu Rayleigh'a po nieliniowym zbiorze parametrów A korzystając z metody *simpleksów*

$$E = \min_A \left[\frac{\langle f(r) | h_1 | f(r) \rangle}{\langle f(r) | f(r) \rangle} \right]. \quad (14)$$

W poniższej pracy przyjęto obecność pola elektrycznego, jak i oddziaływania elektron-elektron tylko na etapie diagonalizacji dwu-elektronowego Hamiltonianu. Baza jednoelektronowa uzyskana $F = 0$ jest na tyle elastyczna aby opisać efekt działania na elektrony pola elektrycznego w zakresie badanym w tej pracy (testy są podane poniżej).

Zapisując funkcję falową jako rozwinięcie w bazie gaussowskiej, jednoelektronowe równanie Schrödingera możemy zapisać następująco

$$\sum_i h d_i f_i = E \sum_i d_i f_i. \quad (15)$$

Następnie mnożymy obustronnie powyższe równanie przez $f_j \forall j$ i całkujemy obydwie strony równania po całej przestrzeni, otrzymując

$$\sum_i d_i \langle f_j | h | f_i \rangle = E \sum_i d_i \langle f_j | f_i \rangle, \quad (16)$$

gdzie $h_{ij} = \langle f_j | h | f_i \rangle$ jest elementem macierzowym hamiltonianu, a $S_{ij} = \langle f_j | f_i \rangle$ jest całką przekrywania funkcji falowych. Równanie możemy zapisać w postaci macierzowej

$$\mathbf{hc} = E\mathbf{Sc}. \quad (17)$$

Powyższe równanie własne rozwiązujemy metodą podwójnej diagonalizacji, wykorzystując procedurę *zheegv* z biblioteki numerycznej *lapack*

Problem dwuelektronowy

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (18)$$

rozwiązujemy analogicznie do problemu jednoelektronowego, z tym że macierz przekrywania jest jednostkowa bo elementy bazowe (9) są ortonormalne. Elementy macierzowe hamiltonianu mają postać

$$\langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle = (\epsilon_1 + \epsilon_2) \delta_{ij} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \langle \Psi_i | \frac{1}{|\mathbf{r}_{12}|} | \Psi_j \rangle + |e|\mathbf{F} \cdot \langle \Psi_i | (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_x) | \Psi_j \rangle. \quad (19)$$

Co możemy zapisać jako

$$\mathbf{Hc} = \mathbf{Ec}. \quad (20)$$

Powyższe równanie własne rozwiązujemy metodą diagonalizacji, wykorzystując procedurę *zheev*.

Wyniki uzyskanie opisaną powyżej metodą porównamy z wynikami uzyskanymi metodą różnic skończonych. Uzyskano bardzo dobrą zgodność. Wykorzystanie bazy gaussowskiej do uzyskania jednoelektronowej funkcji falowej jest dużo wygodniejsze dla dalszej diagonalizacji Hamiltonianu dwuelektronowego w porównaniu do funkcji uzyskanych na siatce, ze względu na możliwość dużo szybszego całkowania (które po części jest wykonane analitycznie).

W dyskusji przedstawionej poniżej poruszany będzie problem całkowitej parzystości dwuelektronowej funkcji falowej. Jest to liczba kwantowa opisująca identyczne kropki kwantowe, dla których $\Psi(I\mathbf{r}_1, I\mathbf{r}_2) = \pm\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, gdzie I jest operatorem inwersji względem środka stosu. Funkcje niezmiennicze względem tej operacji będziemy nazywać funkcjami parzystymi, funkcje zmieniające znak natomiast nieparzystymi.

3 Wyniki

3.1 Stany jednoelektronowe

Rys. 6(a) pokazuje zależność dwóch najniższych poziomów energetycznych od pola elektrycznego dla układu dwóch kropek rozdzielonych barierą o grubości $b = 2, 4, 6$ oraz 11 nm. Dla $F = 0$ stan podstawowy jest orbitalem wiążącym [niebieska krzywa na Rys. 6(b)], a pierwszy stan wzbudzony jest orbitalem antywiązącym [czerwona krzywa na Rys. 6(b)]. Orbital wiążący może zostać skonstruowany jako suma jednokropkowych funkcji falowych

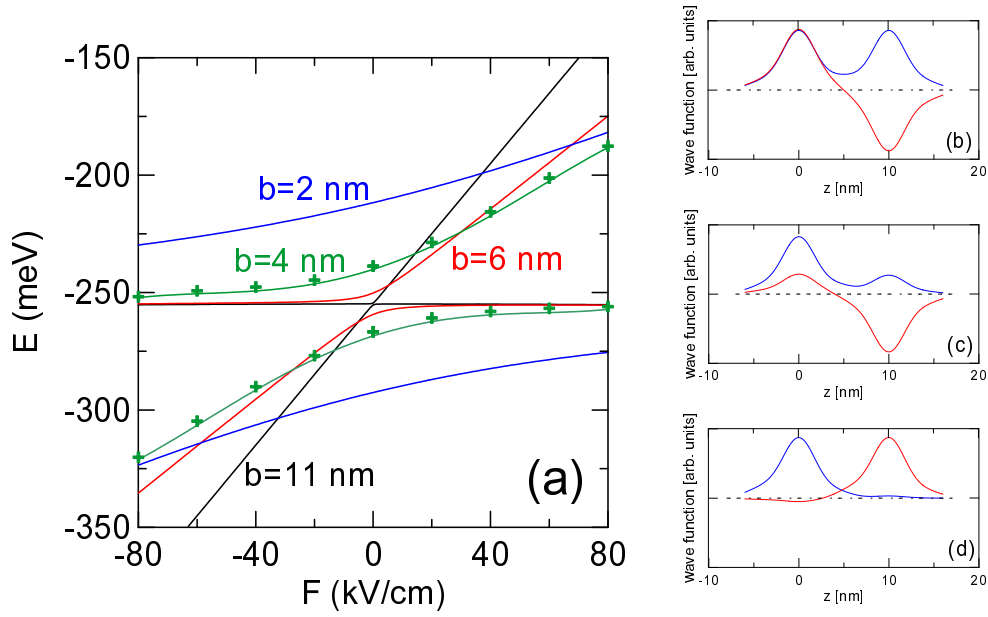
$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 + \psi_2), \quad (21)$$

gdzie ψ_1 i ψ_2 odpowiadają funkcjom falowym dla stanu podstawowego przyjmując, że obie są rzeczywiste i nieujemne w żadnym punkcie [funkcje falowe przedstawione na Rys. 6(d) są niemalże funkcjami jednokropkowymi]. Orbital antywiązący skonstruowany jest jako różnica jednokropkowych funkcji falowych

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 - \psi_2). \quad (22)$$

Dla $F > 0$ pole elektryczne lokalizuje stan podstawowy (wzbudzony) w niższej (wyższej) kropce czego skutkiem jest redukcja sprzężenia tunelowego pomiędzy identycznymi kropkami. Zerwanie sprzężenia tunelowego wiąże się z antykrossingiem tych dwóch poziomów energetycznych [Rys. 6(a)]. Szerokość antykrossingu (najmniejsza odległość pomiędzy poziomami energetycznymi) jest miarą siły sprzężenia tunelowego pomiędzy kropkami. Dla $b = 2$ nm odległość ta jest rzędu 100 meV, podczas gdy dla $b = 11$ odległość wynosi jedynie 0.74 meV. W silnym polu elektrycznym zarówno stan podstawowy jak i pierwszy stan wzbudzony staje się zlokalizowany w jednej z kropek [Rys. 6(c,d)]. Poza obszarem antykrossingu jeden z poziomów energetycznych staje się niemalże niezależny od F [Rys. 6(a)]. Ten stan jest zlokalizowany w dolnej kropce gdzie przyjęto zero potencjału elektrycznego. Dla $F \ll 0$ stanem zlokalizowanym w dolnej kropce jest stan wzbudzony. Natomiast dla $F \gg 0$ stanem zlokalizowanym w tej kropce jest stan podstawowy [Rys. 6(d)].

Krzyżyki na Rysunku 6(a) pokazują poziomy energetyczne uzyskane metodą różnic skończonych dla $b = 4$ nm. Wyniki te uzyskano na siatce $43 \times 43 \times 43$ punktów rozłożonych w odległości 1nm używając techniki czasu urojonego [21]. Widać bardzo dobrą zgodność tych wyników z tymi uzyskanymi w metodzie korzystającej z bazy wielocentrowej (zielone krzywe).



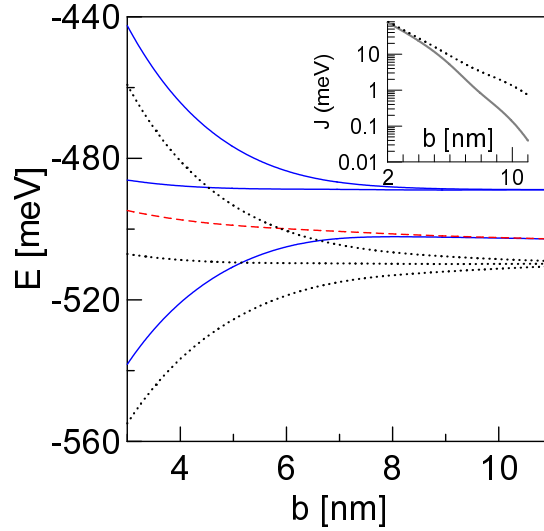
Rysunek 6: (a) Dwa najniższe poziomy energetyczne dla pojedynczego elektronu w dwóch sprzężonych pionowo, identycznych, współosiowych kropkach kwantowych. Pole elektryczne przyłożone jest zgodnie z kierunkiem wzrostu dla odległości pomiędzy kropkami $b = 2, 4, 6$ oraz 11 nm. Krzyżkami zaznaczono wyniki dla $b = 4$ nm uzyskane metodą różnic skończonych. Prawa część rysunku pokazuje wiążące i antywiążące orbitale obliczone dla $b = 6$ nm. Niebieskie krzywe reprezentują funkcje falowe dla stanu podstawowego, czerwone dla pierwszego stanu wzbudzonego. Rysunki przedstawiają odpowiednio funkcje falowe uzyskane dla wartości pola elektrycznego $F = 0, 12$ oraz 100 kV/cm. Przerywane linie pokazują zera na wykresie funkcji falowych.

3.2 Stany dwuelektronowe w przypadku braku pola elektrycznego

Rysunek 7 przedstawia niskoenergetyczną część widma dla pary elektronów w funkcji grubości bariery pomiędzy kropkami. Krzywe kropkowane na Rys. 7 pokazują najniższe poziomy energetyczne dla układu nieoddziałujących elektronów. Wszystkie poziomy energetyczne dla nieoddziałującego układu zaprezentowane na wykresie ulegają degeneracji dla dużych b . Dla dowolnego b w przypadku braku oddziaływania elektron-elektron funkcja falowa stanu podstawowego jest produktem jednoelektronowych orbitali wiążących

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_b(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2). \quad (23)$$

Zastępując zapis orbitali wiążących orbitalami jednoelektronowymi otrzymujemy



Rysunek 7: Najniższe poziomy energetyczne dla układu dwóch elektronów uwięzionych w dwóch identycznych, współosiowych kropkach kwantowych rozdzielonych barierą o grubości b . Czarne kropkowe linie prezentują wyniki dla nieoddziaływających elektronów. Stan podstawowy oraz drugi stan wzbudzony w przypadku nieoddziaływającego układu są niezdegenerowanymi stanami singletowymi. Pierwszy stan wzbudzony jest zdegenerowany i zawiera stan singletowy oraz stan trypletowy. Krzywe ciągłe oraz przerywana odpowiadają przypadkowi oddziaływających elektronów. Krzywe ciągłe prezentują energie stanów singletowych, krzywa przerywana natomiast odpowiada stanowi trypletowemu. Wstawka na wykresie pokazuje energię wymiany dla przypadku z oddziaływaniem (krzywa ciągła) oraz dla układu nieoddziaływających elektronów (krzywa kropkowa).

wyrażenie

$$\begin{aligned} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \frac{1}{2} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \\ & + \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)). \end{aligned} \quad (24)$$

Funkcja falowa stanu podstawowego dla pary nieoddziaływających elektronów dla $b = 6\text{nm}$ zaprezentowana jest na Rys. 8(b). Funkcja falowa z rysunku obliczona jest wzdłuż osi układu ($x_1 = y_1 = x_2 = y_2 = 0$) jako zależność pionowych współrzędnych cząstek. Funkcja posiada cztery maksima odpowiadające lokalizacji elektronów w centrum kropek. Dla nieoddziaływającego układu prawdopodobieństwo znalezienia elektronów w tej samej kropce jest takie samo jak znalezienie ich w kropkach przeciwnych. Jest to wynik, którego spodziewaliśmy się ze względu na brak oddziaływania pomiędzy cząstkami. Energia stanu podstawowego maleje wraz ze zmniejszaniem grubości bariery pomiędzy kropkami [Rys. 7].

Kiedy odległość pomiędzy kropkami maleje energia orbitalu wiążącego maleje, a energia orbitalu wiążącego rośnie. W pierwszym stanie wzbudzonym jeden z elektronów jest w stanie wiążącym, podczas gdy drugi zajmuje orbital antywiązący. Suma energii jednoelektronowych dla pierwszego stanu wzbudzonego jest praktycznie niezależna od b [Rys. 7] ponieważ zmiany energii orbitali wiążącego i antywiązącego praktycznie się znoszą. W przypadku braku oddziaływania drugi stan wzbudzony jest zdegenerowany ze względu na spin pary elektronów. Funkcja falowa dla obu zdegenerowanych stanów może zostać zapisana jako

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)), \quad (25)$$

gdzie ” + ” odpowiada singletowi, a ” - ” trypletowi. Powyższe funkcje falowe mogą zostać zapisane w postaci kombinacji funkcji jednokropkowych:

$$\Psi_{ot}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)), \quad (26)$$

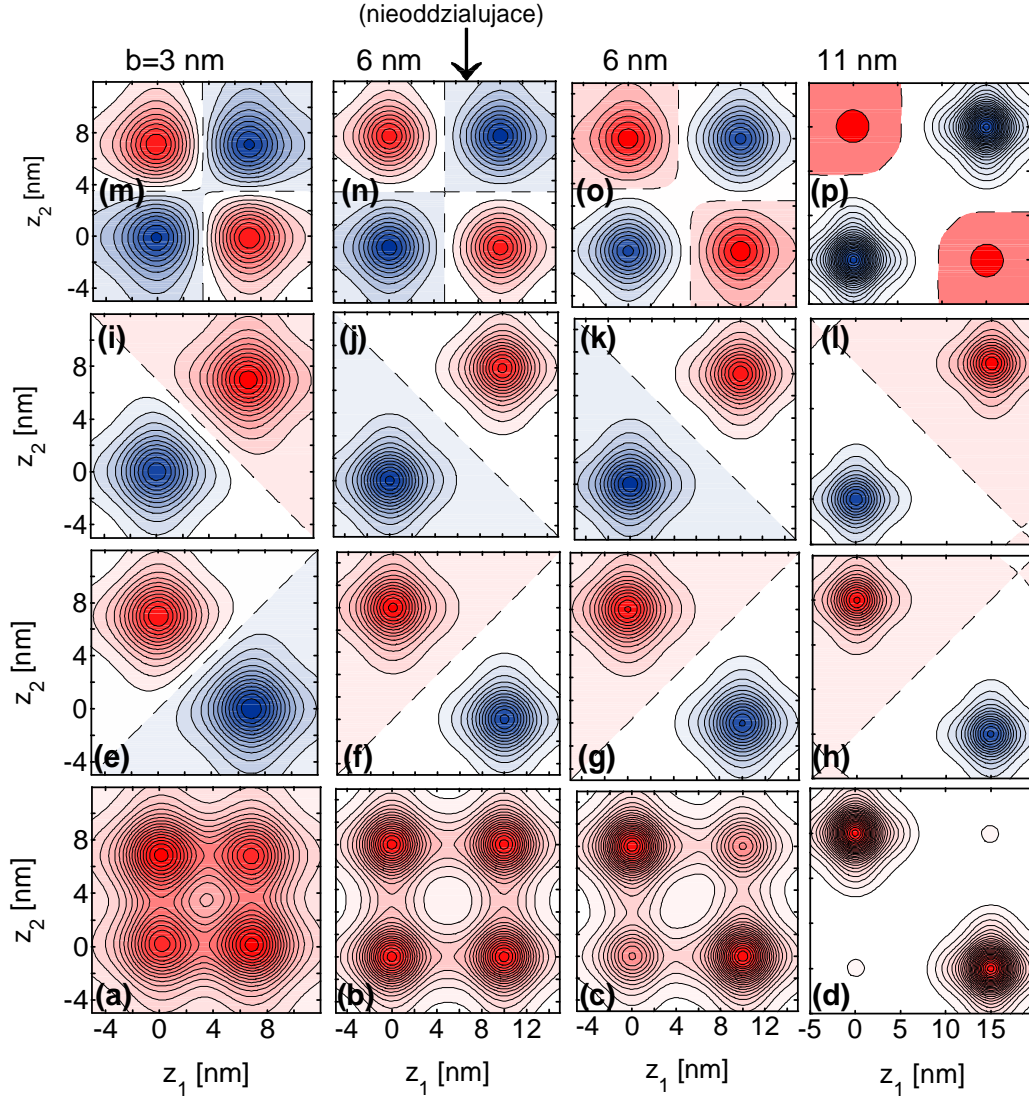
dla nieparzystego trypletu oraz

$$\Psi_{os}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)), \quad (27)$$

dla nieparzystego singletu.

Funkcja falowa dla trypletu przedstawiona jest na Rys. 8(f), a dla singletu na Rys. 8(j). Antysymetria przestrzennej funkcji falowej dla trypletu powoduje, że funkcja przyjmuje wartości niezerowe tylko na antydiagonali ($z_1 = -z_2$) wykresu. Pokazuje to, że dla kropek samozorganizowanych dwa elektrony w stanie trypletowym zajmują przeciwne kropki. Sama antysymetria funkcji falowej nie zabrania elektronom w stanie trypletowym przebywać w tej samej kropce. Elektrony mogą przebywać w jednej kropce tylko wtedy, kiedy zajmują różne poziomy jednoelektronowe (np. podstawowy i pierwszy wzbudzony). Mimo braku zakazu, takiej lokalizacji elektronów w tryplecie nie widzimy na Rys. 8(f). Spowodowane jest to dużą odległością pomiędzy energiami stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego dla pojedynczej samozorganizowanej kropki kwantowej. Dla kropek planarnych prawdopodobieństwo znalezienia dwóch elektronów w tej samej kropce jest mniejsze niż w stanie podstawowym ale nie jest zerowe [6]. Z drugiej strony dla wzbudzonego singletu (trzeciego poziomu energetycznego) niezerowe wartości funkcji falowej znajdują się tylko na diagonalu wykresu ($z_1 = z_2$). W tym przypadku oba elektrony zajmują tą samą kropkę.

Obie funkcje falowe – nieparzystego trypletu i nieparzystego singletu zmieniają znak przy zamianie współrzędnych elektronów względem środka układu $(z_1, z_2) = (5, 5)$ nm. Stan trypletowy jest antysymetryczny względem inwersji względem linii $z_1 = z_2$,



Rysunek 8: Konturowe wykresy funkcji falowych dla dwóch elektronów w układzie pionowo sprzężonych identycznych kropek kwantowych rozdzielonych barierą o grubości $b = 2, 6$ oraz 11 nm w przypadku braku pola elektrycznego ($F = 0$). Wyniki są prezentowane w płaszczyźnie z_1, z_2 dla $y_1 = x_1 = y_2 = x_2 = 0$. Druga kolumna przedstawia wyniki dla grubości bariery $b = 6$ nm w przypadku zaniedbania oddziaływania elektron-elektron. Przerywaną linią zaznaczono zera funkcji falowych. Wykresy (a-d) prezentują stan podstawowy (parzysty stan singletowy), (e-h) pierwszy stan wzbudzony (nieparzysty stan trypletowy), (i-l) drugi stan wzbudzony (nieparzysty stan singletowy), (m-p) trzeci stan wzbudzony (parzysty stan singletowy).

co odpowiada operacji zamiany cząstek [Rys. 8(f)]. Na wykresie stanu singletowego widzimy, że funkcja falowa pozostaje niezmienna względem tej operacji [Rys. 8(j)] –

jest więc symetryczna.

W drugim stanie wzbudzonym dla układu nieoddziałującej pary oba elektrony znajdują się w orbitalach antywiążących. Ten stan jest parzystym stanem singletowym – posiada taką samą symetrię jak stan podstawowy. Funkcję falową możemy zapisać w postaci

$$\Psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2), \quad (28)$$

lub w postaci kombinacji funkcji jednokropkowych

$$\begin{aligned} \Psi_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \frac{1}{2} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \\ & - \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)). \end{aligned} \quad (29)$$

Podobnie jak dla stanu podstawowego prawdopodobieństwa znalezienia elektronów w tej samej lub przeciwnej kropce są jednakowe [Rys. 8(n)].

Zajmijmy się teraz układem z oddziałującymi elektronami. Grube, ciągłe i przerywana krzywa na Rys. 7 prezentują odpowiednio poziomy energetyczne dla stanów singletowych i stanu trypletowego. Trzecia kolumna wykresów na Rys 8(c,g,k,o) pokazuje funkcje falowe dla układu oddziałującego dla grubości bariery $b = 6$ nm. Kolumnę tą należy porównać z kolumną drugą [Rys. 8(b,f,j,n)] (przygotowaną z pominięciem oddziaływania elektron-elektron), która została omówiona powyżej. Porównując wykresy, dostrzegamy zależność pomiędzy parami funkcji dla włączonego i wyłączzonego oddziaływania [Rys. 8(b) i (c), (f) i (g), (j) i (k), (n) oraz (o)]. W przypadku, kiedy uwzględniamy oddziaływanie dla stanu podstawowego [Rys. 8(c)] dwa maksima funkcji falowej leżącej na antydiagonali wykresu – odpowiadające rozseparowanym elektronom – rosną kosztem maksimów leżących na diagonalu wykresu. Oddziaływanie pomiędzy elektronami redukuje sprzężenie tunelowe, rozdzielając elektrony do osobnych kropek.

Oddziaływanie ma jedynie nieznaczny wpływ na funkcje falowe dla najniższego trypletu oraz pierwszego wzbudzonego singletu [Rys. 8(f,g) oraz (j,k)]. Oddziaływanie nie wpływa na funkcje falowe tych stanów ze względu na to, że w niskoenergetycznej części widma tworzonej przez jednoelektronowe funkcje falowe Ψ_1 oraz Ψ_2 nie ma już więcej kombinacji mających wymaganą symetrię. Oddziaływanie pomiędzy elektronami znosi degenerację nieparzystego singletu i nieparzystego trypletu. W symulacji uwzględniającej oddziaływanie tryplet staje się pierwszym stanem wzbudzonym [Rys. 7].

W przeciwieństwie do nieparzystych stanów energetycznych oddziaływanie znacząco zmienia funkcje falowe stanów parzystych: stanu podstawowego oraz trzeciego stanu wzbudzonego. Oba te stany są stanami singletowymi więc mieszanie tych stanów przez oddziaływanie nie zaburza ani przestrzennej ani na spinowej symetrii. W funkcji falowej

trzeciego wzbudzonego stanu energetycznego [pierwszego parzystego stanu singletowego – Rys. 8(o)] zauważamy przeciwną tendencję rozmieszczenia elektronów porównując do stanu podstawowego. Prawdopodobieństwo znalezienia elektronów będących w tym stanie w jednej kropce jest znacznie większe. Jest to konsekwencją ortogonalności tego stanu do stanu podstawowego posiadającego taką samą symetrię przestrzenną i spinową. Reakcja tych stanów na oddziaływanie jest w rzeczywistości powodowana mieszaniem funkcji falowych nieoddziałujących elektronów Ψ_0 oraz Ψ_3 powodowanym przez oddziaływanie. Stopień z jakim stany Ψ_0 i Ψ_3 są mieszane przez oddziaływanie zależy od siły sprzężenia tunelowego (różnicy jednoelektronowych wiążących i antywiązących poziomów energetycznych) oraz energii oddziaływania elektron-elektron. Dla $b = 6$ nm energia oddziaływania (w stanie podstawowym równa $\simeq 13.7$ meV) jest porównywalna z odległością poziomów energetycznych orbitalu wiążącego i antywiązącego ($\simeq 9.1$ meV). Funkcje falowe dla oddziałującej pary elektronów przy szerokości bariery $b = 3$ nm prezentowane są na Rys. 8 (a,e,i,m). Dla $b = 3$ nm energia oddziaływania oraz różnica energii stanu wiążącego oraz antywiązącego wynoszą odpowiednio $\simeq 16.7$ oraz $\simeq 47.9$ meV dla stanu podstawowego. Ze względu na bardzo dużą siłę sprzężenia tunelowego funkcje falowe dla takiej szerokości bariery są nieznacznie modyfikowane przez oddziaływanie. Na Rys. 8(a) widzimy, że maksima na antydiagonali są jedynie nieznacznie wyższe niż maksima na diagonalu. Analogiczna sytuacja występuje dla trzeciego stanu wzbudzonego [Rys. 8(m)].

Funkcje falowe w układzie słabo sprzężonych kropek (w tym przypadku $b = 11$ nm) zaprezentowane są w ostatniej kolumnie Rys. 8. W stanie podstawowym funkcja falowa przyjmuje jedynie dwa resztkowe maksima na diagonalu [Rys. 8(d)]. Funkcja falowa stanu podstawowego w przypadku bardzo słabego oddziaływania pomiędzy elektronami może zostać zapisana jako

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0 - \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)), \quad (30)$$

podczas gdy funkcja falowa parzystego singletu

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0 + \Psi_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)). \quad (31)$$

W stanie opisanym funkcją (30) oba elektrony zajmują różne kropki, podczas gdy w stanie opisywanym funkcją falową (31) oba elektrony znajdują się w tej samej kropce [numeryczne wyniki prezentowane na Rys. 8(p) oddają tę zależność – przestrzenie o jednakowym, dużym nasyceniu koloru powodowane są przyjętą skalą wartości funkcji falowych – w rzeczywistości dużo mniejszym niż kolor niebieski].

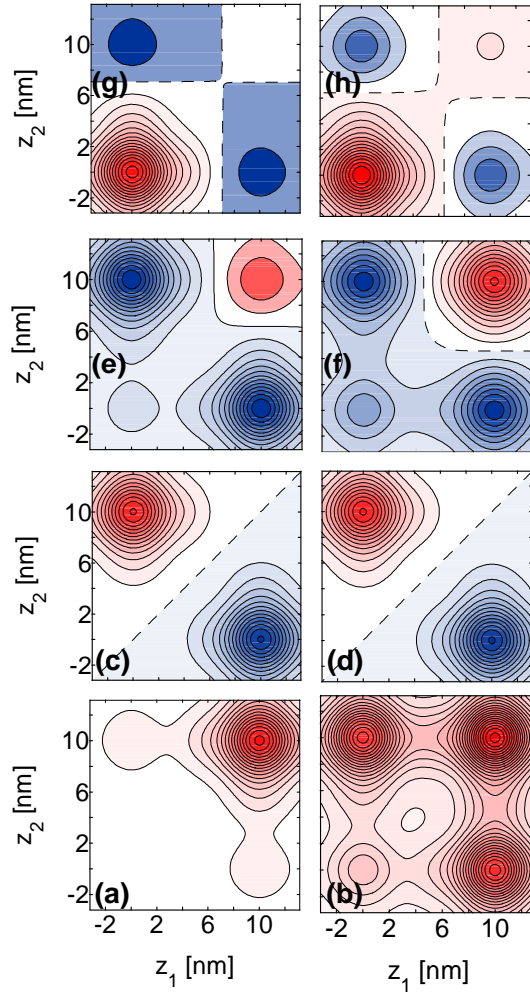
Należy zauważyć, że dla słabego sprzężenia kropek gęstość prawdopodobieństwa dla stanu podstawowego [najniższy singlet – Rys. 8(d)] osiąga niemalże takie same

wartości jak dla pierwszego stanu wzbudzonego [najniższy tryplet – Rys. 8(h)]. Konsekwencją tego faktu jest degeneracja energii tych stanów dla dużych wartości b [Rys. 7]. Dwa wzbudzone stany singletowe – stan nieparzysty [Rys. 8(h)] i stan parzysty [Rys. 8(p)] także realizują taki sam rozkład gęstości prawdopodobieństwa, a odpowiadające im poziomy energetyczne stają się zdegenerowane w miarę słabnięcia sprzężenia pomiędzy kropkami dla dużych wartości b [Rys. 8]. Należy także zauważyć, że energia zdegenerowanego stanu podstawowego maleje wraz z b , podczas gdy energia zdegenerowanego stanu wzbudzonego dla większych b jest niezależna od grubości bariery. Jest to spowodowane tym, że dla zdegenerowanego stanu wzbudzonego, oba elektrony zajmują tę samą kropkę, więc odległość do drugiej (pustej) kropki jest bez znaczenia. Dla elektronów zajmujących przeciwne kropki (zdegenerowany stan podstawowy) energia maleje wraz ze wzrostem b , ponieważ oddziaływanie elektron-elektron słabnie na skutek zwiększającej się grubości bariery (a więc odległości pomiędzy elektronami). W granicznym przypadku nieskończonej wartości b energia stanu podstawowego dla oddziałujących elektronów osiąga wartość energii stanu podstawowego układu bez oddziaływania.

Wstawka do Rys. 7 pokazuje energię wymiany (obliczoną jako różnica pomiędzy energią najniższego trypletu a energią najniższego singletu) w funkcji b dla układu oddziałujących (ciągła linia) oraz nieoddziałujących (linia przerywana) elektronów. Energia wymiany dąży do zera kiedy elektrony zostają rozseparowane do różnych kropek. Zgodnie z dyskusją przedstawioną powyżej, przy braku tunelowania o energii danego stanu decyduje rozkład elektronów, a nie symetria przestrzenna funkcji falowych. W obu stanach, najniższym singlcie i najniższym tryplecie oddziaływanie zwiększa stopień separacji elektronów. Jest to powodem większej wartości wymiany dla dużych wartości b dla układu oddziałującego. Dla małych wartości grubości bariery b głównym czynnikiem wpływającym na energię wymiany jest stopień sprzężenia tunelowego pomiędzy kropkami. W tym przypadku oddziaływanie pomiędzy elektronami ma pomijalnie mały wpływ na energię wymiany.

3.3 Energia wymiany dla pola elektrycznego zorientowanego pionowo dla identycznych, współosiowych kropek kwantowych

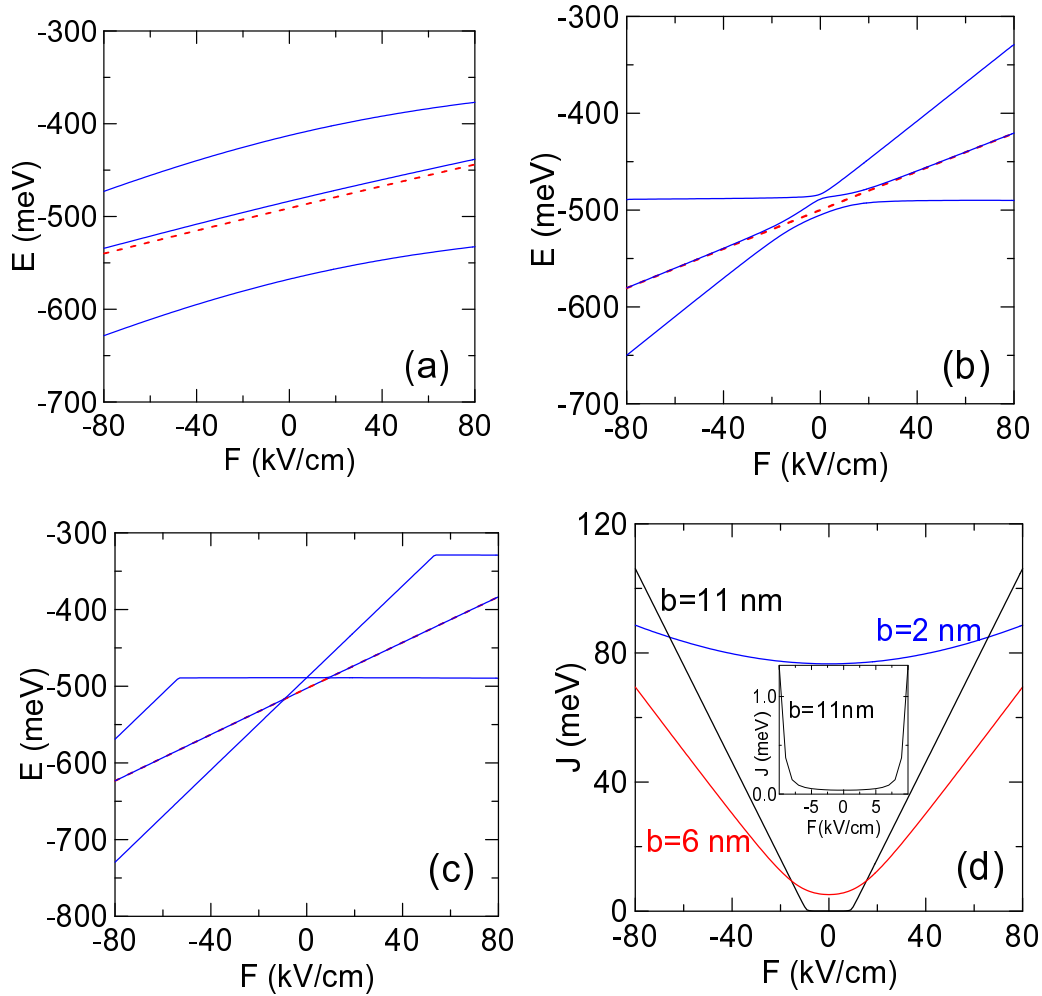
Rys. 9 prezentuje funkcje falowe czterech najniższych poziomów energetycznych dla pola elektrycznego przyłożonego równoległe do osi kropek dla $b = 6$ nm [odpowiednie funkcje falowe w przypadku braku pola elektrycznego prezentowane są na Rys.



Rysunek 9: Wykres analogiczny jak dla Rys. 8 dla $b = 6$ nm dla dwóch wartości pola elektrycznego.

8(c,g,k,o)]. Poziomy energetyczne odpowiadające tym funkcjom falowym pokazane są na Rys. 10(b). W stanie podstawowym już dla $F = -12$ kV/cm prawdopodobieństwo znalezienia obu elektronów w dolnej kropce jest niemalże zerowe [porównanie wykresów z Rys. 9(b) z Rys. 8(c) dla $F = 0$]. Dla większych pól elektrycznych o wartości $F = -50$ kV/cm [Rys. 9(a)] w stanie podstawowym oba elektrony zostają zlokalizowane w górnej kropce. Dla $F \gg 0$ w stanie podstawowym oba elektrony zajmują niższą kropkę, gdzie potencjał pola elektrycznego ma wartość zero. Z tego powodu obserwujemy brak zależności energii od F dla dodatnich wartości pola. Dla stanu podstawowego oraz wartości $F \ll 0$ obserwujemy liniowy spadek energii tego stanu wraz ze zmniejszaniem F [Rys. 10(b)]

Energia najniższego stanu trypletowego jest liniowo zależna od F po obu stronach $F = 0$ [czerwona przerywana krzywa na Rys. 10(b)]. Dla ujemnych wartości F nachyle-



Rysunek 10: (a-c) cztery najniższe stany energetyczne dla sprzężonej pary elektronów dla identycznych, symetrycznie ułożonych kropek kwantowych rozdzielonych barierą o grubości $b = 2$ nm, $b = 6$ nm oraz $b = 11$ dla pola elektrycznego zorientowanego zgodnie z osią wzrostu kropek. Dodatkowo pole przesuwają elektrony w górę/dół. Ciągłe niebieskie krzywe reprezentują energie stanów singletowych. Czerwone krzywe przerywane odpowiadają energiom stanów trypletowych. Rys. (d) prezentuje energię wymiany w funkcji pola elektrycznego dla $b = 2$ nm (krzywa niebieska), $b = 6$ nm (krzywa czerwona) oraz $b = 11$ nm (krzywa czarna). Wstawka pokazuje energię wymiany dla $b = 11$ nm dla wartości pola elektrycznego bliskich zero.

nie krzywej jest dwa razy mniejsze niż dla stanu podstawowego. Powodem tego jest to, że dla większych wartości $|F|$ jeden z elektronów zostaje zlokalizowany w niższej kropce, w której potencjał pola elektrycznego ustalony jest na zero, zależność od F pochodzi więc jedynie od drugiego elektronu pozostającego w wyższej kropce [Rys. 9(c,e)]. Należy zauważyć, że podobną zależność obserwujemy dla pierwszego wzbudzonego singletu poza obszarem małych wartości F . W drugim wzbudzonym singlicie

oba elektrony zajmują kropkę gdzie potencjał elektryczny jest największy [Rys. 9(g,h)].

Z teorii rachunku zaburzeń wiemy, że liniowa zależność energii od zaburzenia osiągnięta jest wtedy, kiedy funkcje falowe nie są modyfikowane przez zaburzenie. Krzywizna (przyjmowanie przez drugą pochodną niezerowych wartości) poziomów energetycznych zależy od F , obserwowana jest tylko wtedy, kiedy pole elektryczne wpływa na dystrybucję elektronów. Na Rys. 10(b) obserwujemy, że energia najniższego trypletu zależy liniowo od F w całym zakresie zmienności F prezentowanym na wykresie na Rys. 10(b) poza obszarem bliskim $F = 0$. Funkcja falowa tego stanu nie reaguje na pole elektryczne [Rys. 9(c,d), a także Rys. 8(k)] ze względu na to, iż transfer elektronów pomiędzy kropkami zabroniony jest przez zakaz Pauliego.

Na Rys. 10(b) możemy zaobserwować, że energie stanów singletowych wykazują nieliniową zależność od F dla słabych pól elektrycznych. Pole elektryczne prowadzi do antykrossingu tych trzech poziomów energetycznych, mieszania odpowiadających im funkcji falowych, oraz transferu ładunku pomiędzy dwoma kropkami. Dla najniższego trypletu nie zaobserwowano antykrossingu. W niskoenergetycznej części widma najniższy tryplet nie ma żadnego innego stanu o takiej samej symetrii spinowej z którym mógłby się mieszać, stąd jego liniowa zależność od F .

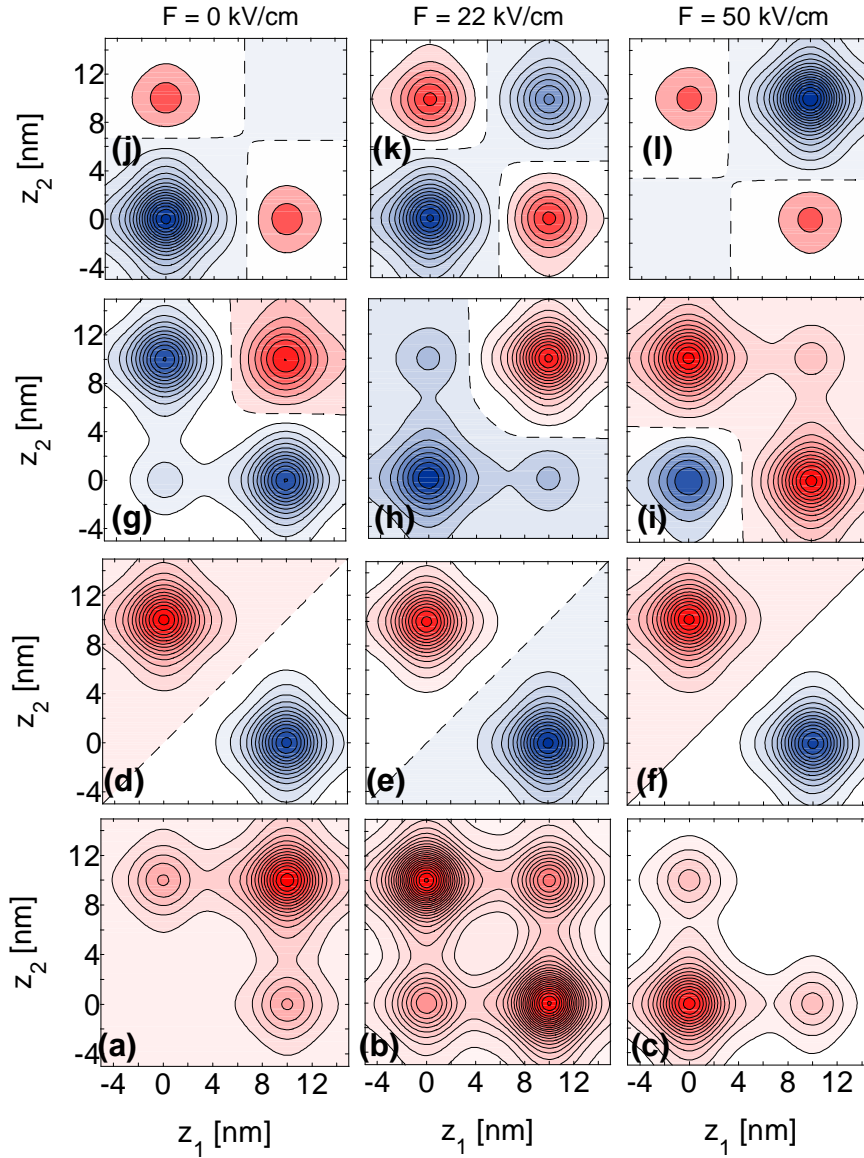
Dla bariery o grubości $b = 11$ nm odległości poziomów energetycznych w antykrosingu są tak niewielkie, że w przypadku skali energii prezentowanej na Rys. 10(c) poziomy energetyczne wydają się przecinać [Rys. 10(c) w porównaniu z Rys. 10(b) dla $b = 6$ nm]. Energia wymiany dla $b = 2, 6$ oraz 11 nm zaprezentowana jest na Rys. 10(d) w funkcji pola elektrycznego. Dla $b = 11$ nm energia wymiany jest praktycznie zerowa dla zakresu $F \in (-10, 10)$ kV/cm (wstawka na Rys. 10(d)). Energia zaczyna rosnąć liniowo wraz z F , od momentu kiedy występuje największe zbliżenie singletowych poziomów energetycznych na Rys. 10(b). Liniowy wzrost następuje kiedy w najniższym stanie singletowym oba elektrony zajmują tę samą kropkę, podczas gdy w najniższym tryplecie zajmują one przeciwne kropki. Dla $b = 6$ nm energia wymiany jest gładką funkcją pola elektrycznego F . Minimum energii wymiany występuje dla $F = 0$. Trypletowy stan nie reaguje na przyłożone pole elektryczne. Z drugiej strony elektrony w stanie singletowym zaczynają zajmować głębszą kropkę. W konsekwencji, kiedy przykładamy pole elektryczne stan singletowy obniża swoją energię w stosunku do stanu trypletowego, czego skutkiem jest minimum energii wymiany dla $F = 0$. Podobne minimum obserwujemy dla mocno sprzężonych kropek [krzywa dla $b = 2$ nm na Rys. 10(d)]. Minimum to jest znacznie płytsze, ze względu na to, że reakcja stanu singletowego na pole jest zmniejszana przez silne sprzężenie tunelowe. W zakresie pól elektrycznych rozpatrywanych w tej pracy układ kropek o barierze o szerokości $b = 2$

nm jest w praktyce pojedynczą wnęką potencjału.

3.4 Energia wymiany dla pola elektrycznego zorientowanego pionowo – wpływ niewspółosiowego ułożenia i różnej głębokości kropek

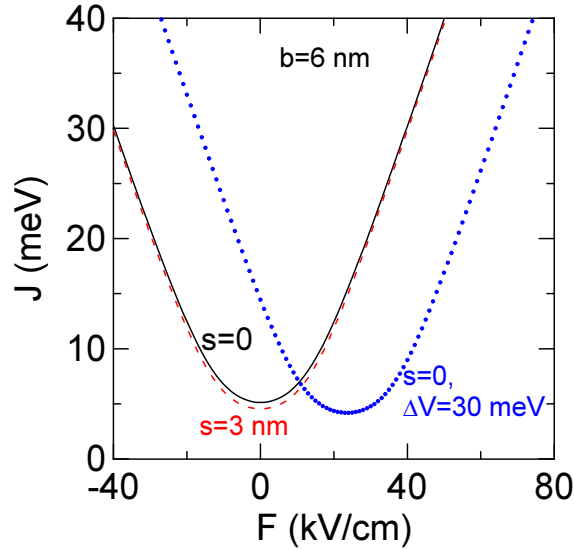
Rozpatrzmy teraz układ, w którym odległość pomiędzy osiami kropek s jest niezerowa, oraz przypadek nieidentycznych kropek (zmieniana jest głębokość górnej kropki).

Rys. 11 przedstawia konturowe wykresy funkcji falowych czterech najniższych poziomów energetycznych dla układu dwóch sprzężonych pionowo kropek kwantowych w układzie, gdzie wyższa kropka głębsza jest o $\Delta V = 30$ meV dla pionowo zorientowanego pola elektrycznego o trzech wartościach. W stanie podstawowym [Rys. 11(a-c)] dla wartości pola $F = 0$ maksimum globalne na wykresie odpowiada sytuacji, kiedy oba elektrony zajmują głębszą kropkę (obserwujemy także dwa małe maksima odpowiadające obsadzeniu – jeden elektron w dolnej – drugi w górnej kropce). W pierwszym wzbudzonym poziomie energetycznym (najniższym tryplecie) [Rys. 11(d-f)] elektrony rozdzielone są w różnych kropkach ze względu na zakaz Pauliego. Skutkiem takiej konfiguracji jest wzrost energii wymiany dla $F = 0$ w porównaniu do układu identycznych kropek [Rys. 12]. Efekt ten jest redukowany przez dodatnie wartości F . Pole elektryczne kompensuje asymetrię w głębokości kropek. W stanie singletowym równe obsadzenie obu kropek osiągane jest dla wartości pola bliskich $F = 22$ kV/cm [Rys. 11(b)], dla której obserwujemy minimum energii wymiany.



Rysunek 11: Konturowe wykresy funkcji falowych dla dwóch elektronów w układzie pionowo sprzężonych współosiowych kropek kwantowych rozdzielonych barierą o grubości $b = 6$ w przypadku kiedy górna kropka głębsza jest o $\Delta V = 30$ meV dla pionowo skierowanego zewnętrznego pola elektrycznego. Wyniki są prezentowane są analogicznie do Rys. 8.

Rys. 12 pokazuje wpływ niewspółosiowego rozmieszczenia kropek, przypadku kiedy kropki mają różną głębokość na energię wymiany w funkcji pola elektrycznego skierowanego pionowo. Czerwona przerywana krzywa została uzyskana dla identycznych kropek, których osie przesunięte są wobec siebie o $s = 3$ nm wzdłuż osi x . Takie rozmieszczenie kropek skutkuje zmniejszeniem sprzężenia tunelowego, czego z kolei skutkiem jest zmniejszenie energii wymiany w porównaniu do kropek, których centra



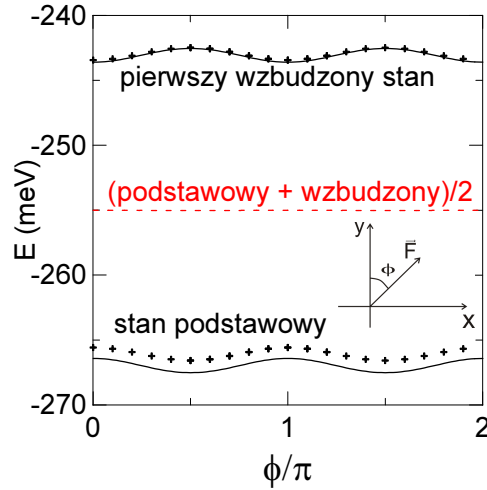
Rysunek 12: Energia wymiany dla pary elektronów w układzie dwóch kropek kwantowych z barierą o szerokości $b = 6$ nm w zewnętrznym polu elektrycznym skierowanym pionowo. Ciągła czarna krzywa reprezentuje przypadek kropek współosiowych ($s = 0$). Przerwana niebieska krzywa pokazuje wyniki dla układu w którym osie kropek oddległe są o $s = 3$ nm. Kropkowana krzywa odpowiada wynikom dla układu kropek leżących w osi, z dolną kropką głębszą o 30 meV.

leżą w jednej osi (czarna krzywa na Rys. 12).

Niebieska kropkowa krzywa na Rys. 12 reprezentuje energię wymiany dla układu nieidentycznych współosiowych kropek. Wyższa kropka jest głębsza o 30 meV. Jak zostało wyjaśnione w dyskusji powyżej, w przypadku braku pola elektrycznego, różna głębokość kropek skutkuje zwiększeniem energii wymiany w porównaniu do układu identycznych kropek.

3.5 Najniższy stan singletowy i trypletowy pod wpływem pola elektrycznego prostopadłego do osi wzrostu

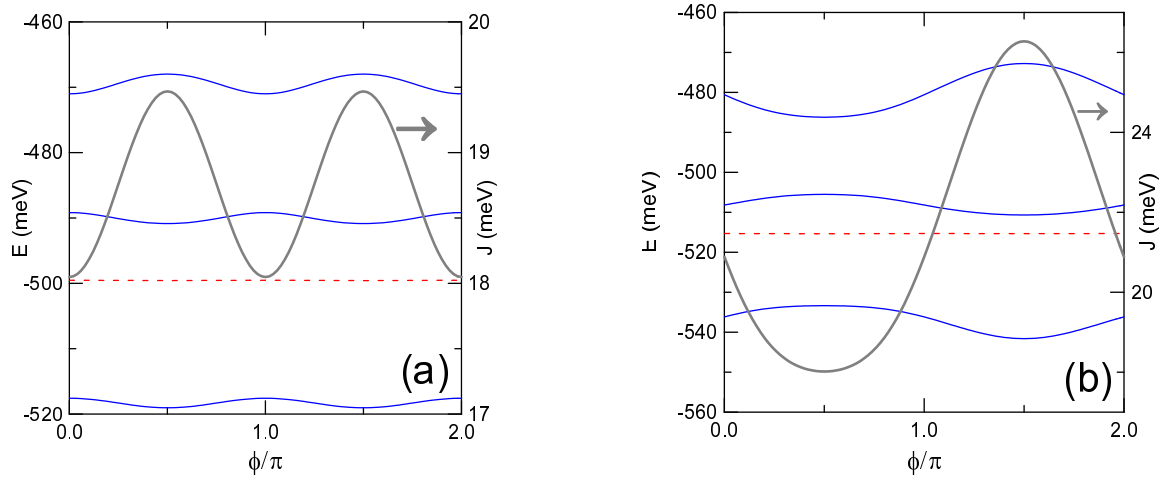
Tak długo, jak pole elektryczne przykładane jest w kierunku pionowym (kierunku wzrostu kropek), efektem nieosiowego ułożenia kropek jest jedynie osłabienie sprzężenia tunelowego pomiędzy kropkami. Tylko w przypadku przyłożenia pola skierowanego prostopadle do osi kropek pole ma znaczący wpływ na poziomy energetyczny układu. Na Rys. 13 pokazano energie poziomu podstawowego i pierwszego wzbudzonego poziomu energetycznego dla identycznych kropek, których osie leżą w odległości $s = 5$ nm w kierunku x . Do układu przyłożono słabe pole elektryczne o wartości $F = 20$ kV/cm,



Rysunek 13: Ciągłe krzywe prezentują energie stanu podstawowego oraz pierwszego stanu wzbudzonego dla pojedynczego elektronu w układzie dwóch kropek kwantowych z barierą o grubości $b = 6$ nm, których osie rozsunięto o $s = 5$ nm w funkcji kierunku wektora pola elektrycznego o wartości $F = 20$ kV/cm skierowanego prostopadłe do kierunku wzrostu kropek. Dla $\phi = \pi/2$ pole jest skierowane równoległe, a dla $\phi = 3\pi/2$ antyrównoległe do osi x (kierunku przesunięcia osi kropek) [wstawka]. Przerywana krzywa pokazuje średnią arytmetyczną tych dwóch poziomów energetycznych. Krzyżyki pokazują wyniki uzyskane metodą różnic skończonych.

które jest obracane w płaszczyźnie (x, y) . Wektor pola elektrycznego określany jest jako $\mathbf{F} = F(\sin(\phi), \cos(\phi), 0)$. Dla współosiowego ułożenia kropek ($s = 0$) obracanie pola elektrycznego nie ma praktycznie żadnego wpływu na widmo energetyczne. Na Rys. 13 widzimy, że energia poziomu podstawowego jest minimalna w przypadku pola skierowanego wzdłuż osi x – kierunku w którym przesunięte są osie kropek. Funkcja falowa stanu podstawowego staje się zlokalizowana w kropce, której potencjał zostaje obniżony przez pole elektryczne. Oscylacje energii pierwszego stanu wzbudzonego wraz z ϕ są w antyfazie z oscylacjami energii stanu podstawowego. Podczas gdy funkcja falowa stanu podstawowego lokalizuje się w głębszej kropce, funkcja falowa pierwszego stanu wzbudzonego zajmuje płytszą kropkę ze względu na wymóg ortogonalności. Należy zauważyć także, że średnia arytmetyczna energii tych dwóch poziomów jest stała i niezależna od kierunku pola elektrycznego (przerywana krzywa na Rys. 13). Krzywe przedstawione na Rys. 13 zostały uzyskane w bazie gaussowskiej podczas gdy krzyżyki na Rys. 13 pokazują energie uzyskane metodą różnic skończonych. Obie metody pozwalają uzyskać bardzo zbliżone wyniki. W bazie gaussowskiej zastosowano cztery centra, ułożone w krzyż w płaszczyźnie (x, y) . Ilość ta mogłaby wydawać się zbyt mała, jednak w wynikach przedstawionych na Rys. 15 nie obserwujemy ziarnistości bazy, która

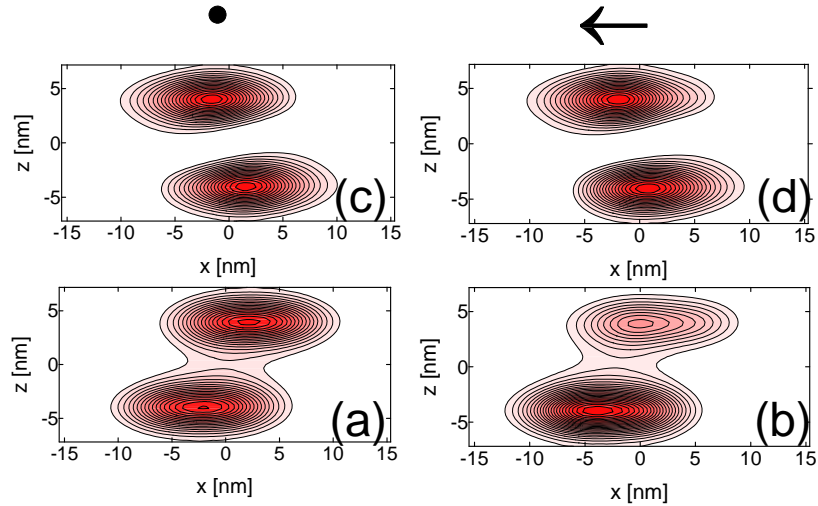
mogłaby wynikać ze zbyt małej ilości centr.



Rysunek 14: (a) Ciągłe niebieskie oraz przerywane czerwone krzywe prezentują cztery najniższe dwuelektronowe poziomy energetyczne pary elektronów w funkcji orientacji słabego ($F = 20$ kV/cm) pola elektrycznego w płaszczyźnie (x, y) . Osie identycznych kropek rozdzielonych barierą o grubości $b = 6$ nm leżą w odległości $s = 5$ nm. Wartości energii zaznaczono na lewej osi. Szara krzywa pokazuje energię wymiany, a jej wartości naniesiono na prawej osi. Rysunek (b) pokazuje wyniki analogiczne do (a) jednak dla przypadku gdzie dolna kropka jest głębsza o 20 meV. Dla $\phi = 3\pi/2$ pole elektryczne powoduje spychanie elektronów do dolnej kropki. W obu przypadkach energia wymiany wzięta jest jako różnica pomiędzy energiami prezentowanymi przez najniższą przerywaną a najniższą ciągłą krzywą.

Na Rys. 14(a) zaprezentowano energie trzech najniższych stanów singletowych (ciągłe niebieskie krzywe) oraz energię najniższego stanu trypletowego (czerwona przerywana krzywa) dla pary elektronów uwięzionych w dwóch pionowo sprzężonych kropkach, tak jak to zostało opisane na Rys. 13. Widzimy, że dla niezerowych wartości s energia stanu podstawowego jest minimalna dla pola elektrycznego równoległego do osi x , tj. kiedy pole skierowane jest w kierunku, w którym przesunięte są osie kropek. Energia stanu podstawowego osiąga maksima kiedy pole elektryczne skierowane jest prostopadle do kierunku przesunięcia osi kropek. Ewolucja dwuelektronowego stanu podstawowego zachowuje się zgodnie z tendencją wyznaczoną przez ewolucję energii jednoelektronowego stanu podstawowego [Rys. 13].

Rys. 15 pokazuje gęstość ładunku w stanie najniższego singletu [wykresy (a,b)] oraz najniższego trypletu [wykresy (c,d)] dla pola elektrycznego skierowanego wzdłuż kierunku y (lewe wykresy) oraz wzdłuż osi x (prawe wykresy). Dla pola elektrycznego



Rysunek 15: Gęstość ładunku dla stanu podstawowego (a,b) [najniższy singlet] oraz dla pierwszego stanu wzbudzonego (c,d) [najniższy tryplet] dla dwóch identycznych kropek o osiach leżących w odległości $s = 5$ nm w kierunku x w słabym polu elektrycznym o wartości 30 kV/cm skierowanym w płaszczyźnie (x, y) . Na Rys. (a,c) pole skierowane jest prostopadle do osi x . Na Rys. (b,d) siła elektryczna działająca na elektrony skierowana jest w lewo (strzałka na rysunku).

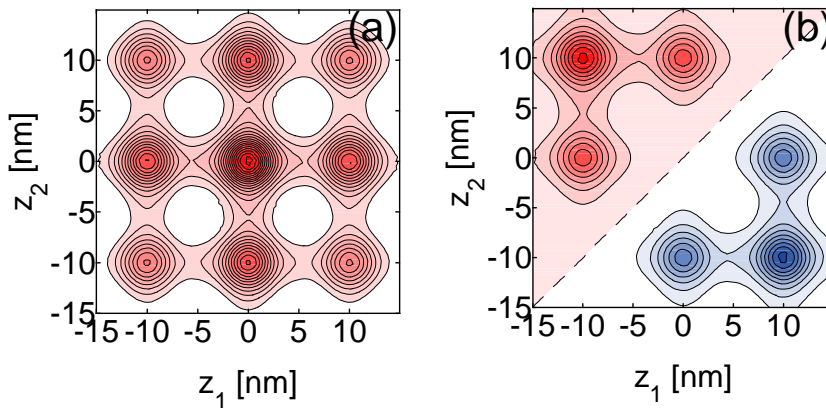
skierowanego wzdłuż osi y [Rys. 14(a,c)] zarówno w stanie trypletowym jak i singletowym każda z kropek zawiera jeden elektron. Kiedy pole zostaje skierowane wzdłuż osi x [Rys. 14(b,d)] w stanie singletowym pole elektryczne przenosi ładunek do dolnej kropki co powoduje spadek energii stanu podstawowego. W stanie trypletowym obserwujemy, że pole elektryczne nie ma wpływu na transfer ładunków między kropkami. Transfer w tym stanie uniemożliwiony jest przez zakaz Pauliego. Konsekwencją tego, jest brak zależności energii pierwszego wzbudzonego stanu od tak skierowanego pola elektrycznego [Rys. 14(a)]. Fakt ten można także wyjaśnić biorąc pod uwagę to, że funkcja falowa najniższego trypletu zbudowana jest głównie z antysymetryzowanych jednoelektronowych funkcji falowych stanu podstawowego oraz jednoelektronowych funkcji falowych pierwszego jednoelektronowego stanu wzbudzonego. Suma tych energii jednoelektronowych jest niezależna od orientacji pola elektrycznego [Rys. 13]. Ponadto, energia oddziaływania elektron-elektron powinna być niezależna od ϕ ponieważ nie obserwujemy zmian w dystrybucji ładunku pomiędzy kropkami dla stanu trypletowego (Rys. 15).

Szara krzywa na Rys. 14(a) pokazuje energię wymiany w funkcji orientacji pola elektrycznego. Energia ta jest maksymalna dla pola skierowanego równoległe do osi x ,

kiedy poziom singletowy obniża swoją energię na skutek podwójnego obsadzenia dolnej kropki której potencjał zostaje obniżony przez pole elektryczne. Takie podwójne obsadzenie jest niemożliwe dla stanu trypletowego, co zostało opisane w dyskusji powyżej.

Rys. 14(b) pokazuje wpływ obrotów pola elektrycznego w przypadku kiedy jedna z kropek z rysunku jest głębsza o 20 meV. Podobnie jak w przypadku identycznych kropek energia stanu trypletowego nie zależy od orientacji pola elektrycznego. Dla $\phi = \pi/2$ potencjał pola elektrycznego kompensuje różnicę w głębokościach kropek. W wyniku tego energia stanu podstawowego osiąga maksimum. Asymetria głębokości potencjałów kropek jest zwiększana dla $\phi = 3\pi/2$ co skutkuje osiąganiem minimum przez energię stanu podstawowego. Zależność energii stanu podstawowego od ϕ przekłada się bezpośrednio na zmiany energii wymiany. Należy zauważyć ponadto, że dla nieidentycznych kropek amplituda zmian energii wymiany wraz z ϕ jest dużo większa w porównaniu do przypadku identycznych kropek [Rys. 14(a) oraz (b)].

3.6 Układ trzech kropek sprzężonych pionowo



Rysunek 16: Rysunek analogiczny do Rys. 8. Para nieoddziałujących elektronów w układzie trzech współosiowych, identycznych kropek kwantowych rozdzielonych barierami potencjału o grubości $b = 6$ nm, (a) odpowiada stanowi podstawowemu (najniższy singlet), (b) pierwszemu stanowi wzbudzonemu (najniższy tryplet).

Konturowe wykresy funkcji falowych najniższego stanu singletowego oraz najniższego stanu trypletowego nieoddziałującej pary elektronów w układzie trzech kropek zaprezentowane są na Rys. 16. Wykresy wykonane są w płaszczyźnie (z_1, z_2) dla $y_1 = x_1 = y_2 = x_2 = 0$. Przyjęto, że kropki leżą idealnie w osi, są identyczne oraz rozseparowane barierami o grubości $b = 6$ nm. Funkcja falowa stanu podstawowego [Rys. 16(a)] posiada 9 maksimum odpowiadających obu elektronom zlokalizowanym w

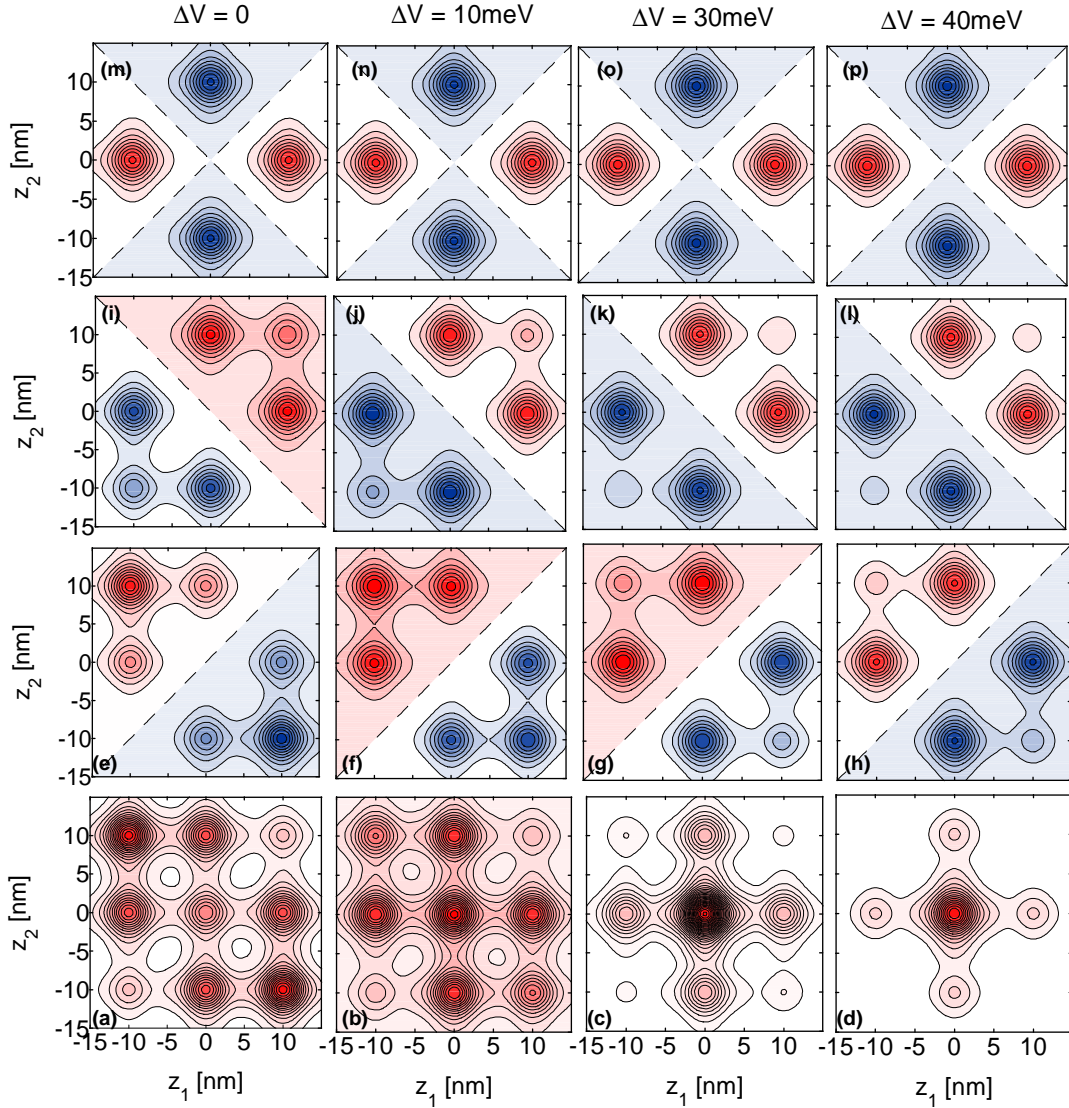
jednej z kropek. Globalne maksimum występuje dla przypadku obu elektronów zlokalizowanych w środkowej kropce. W stanie trypletowym funkcja falowa osiąga jedynie 6 ekstremów. Elektrony w tym stanie nigdy nie zajmują tej samej kropki, stąd brak maksimum funkcji falowej na diagonalu wykresu. Spośród tych ekstremów największe związane jest z dwoma elektronami zajmującymi przeciwne końce stosu kropek (pomimo pominięcia oddziaływania w obliczeniach). Jednakże prawdopodobieństwo znalezienia jednego elektronu w centralnej kropce, a drugiego w jednej z krańcowych jest także znaczne (ekstremum na wykresie kiedy jedna ze współrzędnych ma wartość zero, a druga ± 10)

Funkcje falowe dla najniższego stanu trypletowego oraz najniższego stanu singletowego w przypadku obecności oddziaływania zaprezentowana jest na wykresach Ref. 17(a) and (e). Oddziaływanie powiększa maksima odpowiedzialne za lokalizację elektronów w przeciwnych krańcach stosu kropek. W najniższym stanie singletowym lokalne ekstrema na diagonalu są znacznie zmniejszone przez oddziaływanie [Rys. 17(a) oraz 16 (a)].

Wpływ pionowo skierowanego pola elektrycznego na widmo energii przedstawiony jest na Rys. 18. Podobnie jak dla układu dwóch kropek, stan podstawowy reaguje gwałtowniej na pole elektryczne niż stan trypletowy. Prowadzi to do wzrostu energii wymiany. W przeciwieństwie jednak do układu dwóch kropek energia stanu trypletowego nie jest liniową funkcją pola elektrycznego F . Powodem tego jest to, że funkcje falowe stanu trypletowego modyfikowane są przez pole elektryczne co powoduje nieliniową zmianę energii tego stanu. Funkcje falowe najniższego stanu trypletowego dla niezerowych wartości F zaprezentowane są na Rys. 19(c,d). Przyłożenie pola elektrycznego do układu skutkuje tym, że elektrony w stanie trypletowym zajmują środkową i najwyższą kropkę. Dla większych wartości F w stanie singletowym oba elektrony zajmują najwyższą kropkę w stosie. [Rys. 19(a,b)].

3.7 Trzy pionowo ułożone kropki w przypadku kiedy środkowa kropka jest najgłębsza

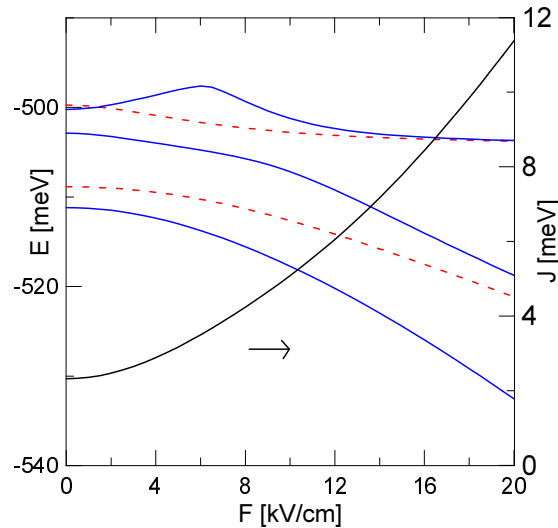
Funkcja falowa dwóch najniższych stanów singletowych oraz dwóch najniższych poziomów trypletowych w przypadku zwiększania głębokości środkowej kropki ΔV zaprezentowana na Rys 17. Kiedy ΔV rośnie w stanie trypletowym jeden z elektronów zaczyna zajmować środkową kropkę. W stanie singletowym oba elektrony zaczynają być zlokalizowane w środkowej kropce. Pierwszy wzbudzony singlet przedstawiony na Rys. 17 (i-l) jest nieparzysty. Funkcja falowa zmienia znak na antydiagonali wykresu. Podobnie do stanu trypletowego w miarę wzrostu ΔV jeden z elektronów zaczyna zaj-



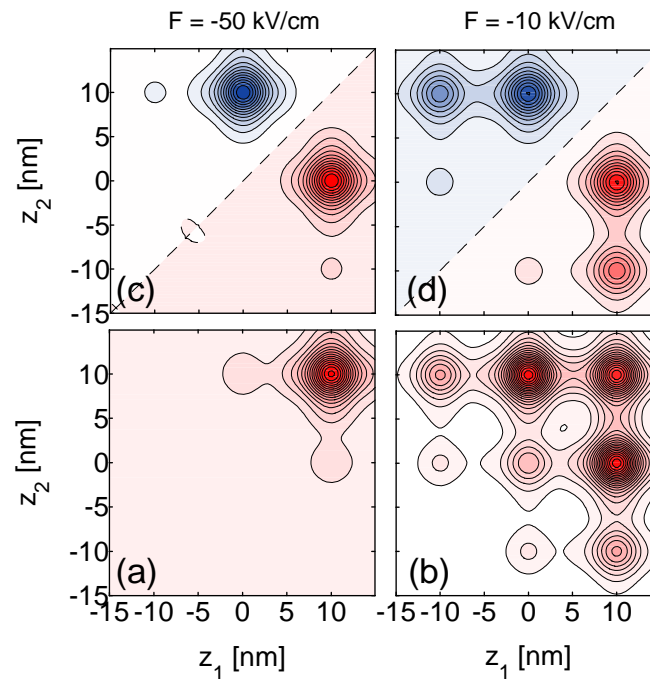
Rysunek 17: Rysunek analogiczny do Rys. 16 teraz dla oddziałujących elektronów. W pierwszej kolumnie (a, e, l, m) kropki są identyczne. W pozostałych kolumnach środkowa kropka jest głębsza o $\Delta V = 10, 30$ oraz 40 meV. Najniższy wiersz wykresów (a-d) odpowiada stanowi podstawowemu, (e-h) najniższemu trypletowi, (i-l) pierwszemu wzbudzonemu singletowi, a (m-p) pierwszemu wzbudzonymi trypletowi.

mować środkową kropkę. Pierwszy wzbudzony tryplet jest stanem parzystym. Funkcja falowa zmienia znak zarówno na diagonalu jak i na antydiagonalu wykresu. Ponadto nie reaguje ona na zmianę głębokości środkowej kropki. Należy także zauważyć, że gęstość prawdopodobieństwa dla wszystkich trzech wzbudzonych stanów przybiera ten sam kształt w miarę wzrostu głębokości środkowej kropki.

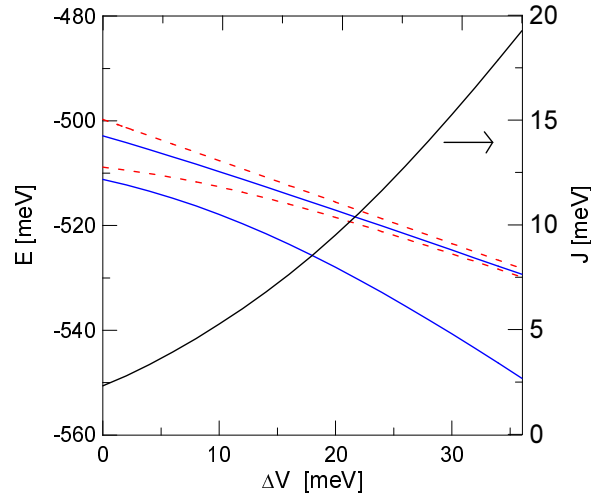
Poziomy energetyczne w funkcji ΔV przedstawia Rys. 20. Obserwujemy, że dla



Rysunek 18: Poziomy energetyczne dla stanów singletowych (niebieskie krzywe) oraz trypletowych (czerwone przerywane krzywe) dla pary elektronów w układzie trzech identycznych kropek kwantowych rozdzielonych barierą $b = 6$ nm w funkcji pola elektrycznego skierowanego zgodnie z kierunkiem wzrostu. Czarna ciągła krzywa pokazuje energię wymiany (wartości pokazano na prawej osi).



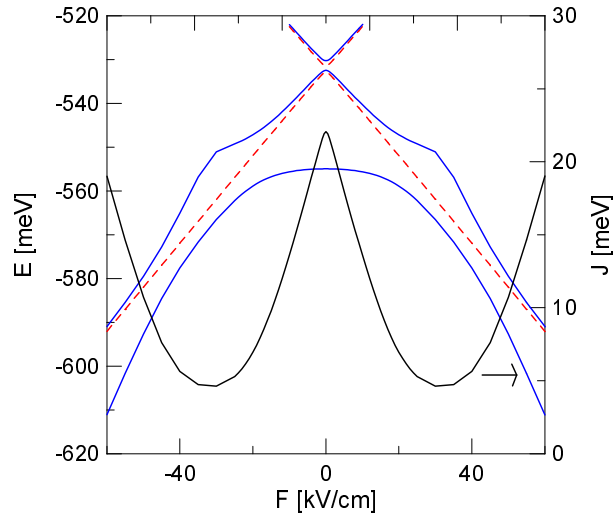
Rysunek 19: Funkcje falowe najniższego singletu (a,b), oraz najniższego trypletu (c,d) dla trzech identycznych kropek kwantowych w zewnętrznym polu elektrycznym skierowanym zgodnie z kierunkiem wzrostu.



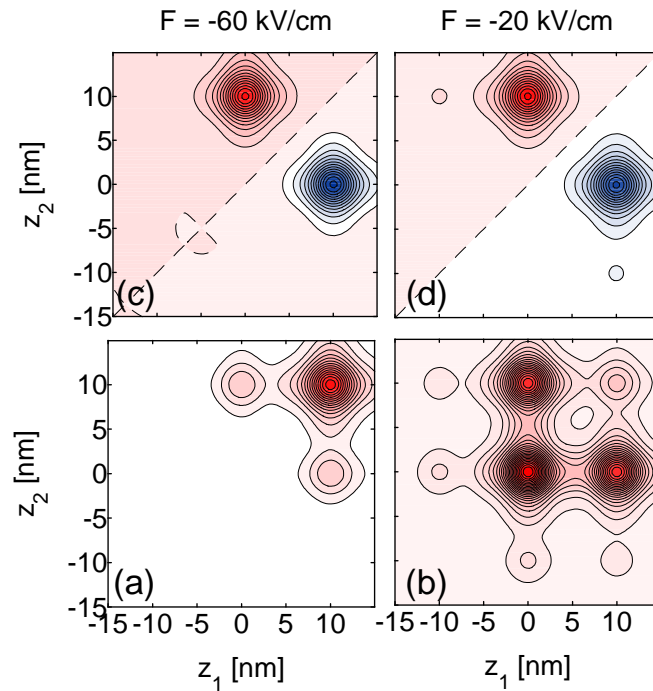
Rysunek 20: Rysunek analogiczny do Rys. 18 tym razem energie jako funkcja głębokości środkowej kropki.

dużych wartości ΔV , energie trzech wzbudzonych stanów stają się zdegenerowane (co wiąże się z osiągnięciem takiego samego kształtu przez rozkład gęstości prawdopodobieństwa). Energia parzystego trypletu jest liniową zależnością w ΔV (jako efekt braku zmiany funkcji falowej). Energia wymiany rośnie o 9 meV kiedy ΔV zmienia się w zakresie od 0 do 36 meV.

W układzie z głębszą centralną kropką, mamy dwa stany trypletowe o zbliżonych energiach i przeciwnych parzystościach. Pole elektryczne z łatwością miesza te dwa stany trypletowe, co skutkuje natychmiastową reakcją pierwszego na pole elektryczne. Rys. 21 pokazuje widmo energetyczne w funkcji zewnętrznego pola elektrycznego. Mieszanie dwóch stanów trypletowych widoczne jest jako antykrossing przerywanych krzywych w pobliżu $F = 0$. Poza antykrossingiem energia stanu trypletowego staje się liniową funkcją F . Funkcja falowa najniższego stanu trypletowego w obecności zewnętrznego pola elektrycznego pokazana jest na Rys. 19(c,d).



Rysunek 21: Rysunek analogiczny do Rys. 18 dla środkowej kropki głębszej o $\Delta dV = 40$.



Rysunek 22: Rysunek analogiczny do Rys. 19 tym razem dla środkowej kropki głębszej o $\Delta V = 40$ meV.

Zależność najniższego stanu singletowego (stanu podstawowego) od pola elektrycznego jest mniejsza. Pole elektryczne próbuje usunąć elektron ze środkowej – najgłębszej kropki [Rys. 22], stąd opóźniona reakcja w porównaniu do energii stanu trypletowego. Fakt ten skutkuje osiągnięciem przez energię wymiany maksimum $F = 0$ (w układzie dwóch identycznych lub trzech identycznych kropek dla $F = 0$ otrzymano

minimum energii wymiany). J posiada dwa minima w pobliżu $F = \pm 30$ kV/cm [Rys. 21]. Energia wymiany zaczyna rosnąć z $|F|$ kiedy dwa elektrony w stanie singletowym zaczynają zajmować jedną z zewnętrznych kropek układu, co jest zabronione dla stanu trypletowego.

4 Podsumowanie i wnioski

W pracy tej została zbadana para elektronów w układzie dwóch oraz trzech pionowo sprzężonych samozorganizowanych kropek kwantowych, przy użyciu metody mieszania konfiguracji jednoelektronowych w trójwymiarowym modelu układu. Został zbadany wpływ nieosiowego ułożenia kropek, oraz ich nieidentycznej głębokości. Szczególny nacisk położony został na sterowanie położeniem elektronów przez pole elektryczne skierowane wzdłuż osi układu. Został przedyskutowany wpływ pola elektrycznego na stany singletowe jak i na stany trypletowe oraz na energię wymiany.

W przypadku kiedy pole jest skierowane wzdłuż osi wzrostu kropek, efektem nieosiowego ułożenia kropek jest jedynie osłabienie sprzężenia tunelowego pomiędzy kropkami co powoduje zmniejszeniem energii wymiany. Nieosiowe ułożenie kropek ma jedynie znaczny wpływ na energię wymiany kiedy pole elektryczne skierowane jest prostopadle do osi układu.

Zaprezentowane wyniki pokazują, że na energię wymiany mają wpływ małe zmiany potencjału uwięzienia tworzonego przez sprzężone kropki oraz, że energią tą można bardzo dobrze sterować zewnętrznym polem elektrycznym.

W ogólnym podejściu dla słabo sprzężonych kropek, oddziaływanie wymienne może być wzbudzone przez zewnętrzne pole elektryczne. Oddziaływanie to nie będzie występować w przypadku braku pola na skutek idealnego rozdzielania w różnych kropkach.

Omówiono także zachowanie układu zbudowanego z trzech kropek kwantowych, w których zbadano wpływ głębokości środkowej kropki na parametry układu oraz reakcję układu na zewnętrzne pole elektryczne skierowane pionowo.

Wartości energii wymiany osiągnięte w badanym systemie są dwa rzędy wielkości większe od tych uzyskiwanych w kropkach planarnych sterowanych elektrycznie. Pokazano ponadto, że w układzie samozorganizowanych kropek kwantowych brak możliwości sterowania barierą pomiędzy kropkami nie wyklucza tego typu układów jako potencjalnej bazy do budowy kwantowej bramki logicznej. Sterowanie sprzężeniem elektronów jest możliwe poprzez zewnętrzne pole elektryczne, a opisane powyżej zalety układu czynią go interesującym ze względu na przyszłe możliwości wykorzystania.

Literatura

- [1] D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [2] S. M. Reimann and M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [3] G. Burkard, D. Loss, and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. B* **59**, 2070 (1999); G. Burkard, G. Seelig, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **62**, 2581 (2000).
- [4] X. Hu and S. Das Sarma, *Phys. Rev. A* **61**, 062301 (2000).
- [5] A Harju, S. Siljamäki, and R. M. Nieminen, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 226804 (2002).
- [6] B. Szafran, F.M. Peeters, and S. Bednarek, *Phys. Rev. B* **70**, 205318 (2004).
- [7] J. Pedersen, C. Flindt, N.A. Mortensen, and A.-P. Jauho, *Phys. Rev. B* **76**, 125323 (2007).
- [8] A. L. Saraiva, M. J. Calderon, and B. Koiller, *Phys. Rev. B* **76**, 233302 (2007).
- [9] W. Häusler and B. Kramer, *Phys. Rev. B* **47**, 16353 (1993). B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, T. Chwiej, and J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **70**, 035401 (2004); E.J. Mueller, *Phys. Rev. B* **72**, 075322 (2005); M.M. Fogler and E. Pivovarov, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, L7 (2006); T. Sako and G.H.F. Diercksen, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 155202 (2008).
- [10] Oosterkamp et al. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4951 (1998)
- [11] R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F. H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 196802 (2005).
- [12] M. Stopa, A. Vidan, T. Hatano, S. Tarucha, and R.M. Westervelt, *Physica E* **34**, 616 (2006).
- [13] D.V. Melnikov, J.-P. Leburton, A. Taha, and N. Sobh, *Phys. Rev. B* **74**, 041309(R) (2006); L.-X. Zhang, D. V. Melnikov, and J.-P. Leburton, *Phys. Rev. B* **74**, 205306 (2006); L.-X. Zhang, D. V. Melnikov, and J.-P. Leburton, *IEEE Transactions on Nanotechnology* **6**, 250 (2007).
- [14] A. Kwasniowski and J. Adamowski, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 215208 (2008).
- [15] S. Moskal, S. Bednarek, and J. Adamowski, *Phys. Rev. A* **76**, 032302 (2007).

- [16] H.J. Krenner, E.C. Clark, T. Nakaoka, M. Bichler, C. Scheurer, G. Absteiter, and J.J. Finley, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 076403 (2006);
- [17] E. A. Stinaff, M. Scheibner, A. S. Bracker, I. V. Pomonarev, V. L. Korenev, M. E. Ware, M. F. Doty, T. L. Reinecke, and D. Gammon, *Science* **311**, 636 (2005); H. J. Krenner, E. C. Clark, T. Nakaoka, M. Bichler, C. Scheurer, G. Absteiter, J. J. Finley, and C. Scheurer, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 076403 (2006); A. S. Bracker, M. Scheibner, M. F. Doty, E. A. Stinaff, I. V. Pomonarev, J. C. Kim, L. J. Whitman, T. L. Reinecke, and D. Gammon, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 233110 (2006); M. Scheibner, M. Yakes, A. S. Bracker, I. V. Ponomarev, M. F. Doty, C. S. Hellberg, L. J. Whitman, T. L. Reinecke, and D. Gammon, *Nature Physics* **4**, 291 (2008).
- [18] M. H. Degani, G. A. Farias, and P. F. Farinas, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 152109 (2006). M.H. Degani and M.Z. Maialle, *Phys. Rev. B* **75**, 115322 (2007); W. Chu and J. L. Zhu, *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053122 (2006); D. Xu, N. Zhao, and J. L. Zhu, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 045204 (2008); B. Szafran, E. Barczyk, F.M. Peeters, and S. Bednarek, *Phys. Rev. B* **77**, 115441 (2008); V. Mlinar and F. M. Peeters, *J. Mater. Chem.* **17**, 3687 (2007).
- [19] B. Szafran, F.M. Peeters, and S. Bednarek, *Phys. Rev. B* **75**, 115303 (2007).
- [20] D. Bellucci, M. Rontani, F. Troiani, G. Goldoni, and E. Molinari, *Phys. Rev. B* **69**, 201308 (2004).
- [21] K.T. Davies, H. Flocard, S. Kreger, and M.S. Weiss, *Nucl. Phys. A* **341**, 112 (1980).