

СТАБИЛЬНОСТЬ И СВОЙСТВА КОНЕЧНЫХ ФЕРМИ-СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦЫ РАЗНОЙ МАССЫ

А. Н. Ипатов, Л. Г. Герчиков*

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 20 августа 2013 г.

Исследуется зависимость свойств конечных двухкомпонентных ферми-систем, содержащих два типа противоположно заряженных частиц, от соотношения их масс. Предложена теоретическая модель на основе квантовомеханического описания системы, содержащей конечное число пар частиц, основанная на приближениях Хартри–Фока и случайных фаз с обменом. В рамках приближения случайных фаз с обменом также разработан метод, позволяющий исключить из спектра возбужденных состояний движение центра масс системы. На основе данной модели были вычислены энергии связи и статические дипольные поляризуемости систем, содержащих 8, 20 и 40 пар противоположно заряженных частиц при различных соотношениях их масс.

DOI: 10.7868/S0044451014010118

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия в мире ведутся интенсивные исследования свойств наноразмерных ферми-систем, содержащих конечное число частиц [1]. Физические свойства, а также теоретические методы описания подобных систем зависят от типа, а следовательно, и от соотношения масс взаимодействующих частиц. Для таких объектов, как отдельные атомы, молекулы и атомные кластеры, у которых соотношение масс атомных ядер (положительных ионов) и электронов составляет несколько порядков, в большинстве случаев только электронная подсистема требует квантовомеханического описания [2–4], в то время как движением положительных зарядов можно пренебречь или использовать методы молекулярной динамики [5].

Напротив, в случае таких физических объектов, как электрон-позитронные кластеры, существование которых было предсказано в ряде недавних работ [6, 7], обе взаимодействующие подсистемы, состоящие из частиц равной массы, требуют квантовомеханического описания. Подобная же ситуация складывается в ядерной физике при теоретическом исследовании структуры атомных ядер [8, 9]. Интерес представляют также такие квантовые объек-

ты, как экситонные капли [10], экситонные молекулы [11, 12] и комплексы, в состав которых, в отличие от электрон-позитронных кластеров, входят частицы разной массы. При этом все эти квантовые системы объединяет ряд общих свойств, таких как, например, высокая поляризуемость и наличие дипольных резонансов в спектре возбужденных состояний [13–15].

В данной работе предлагается теоретическая модель, описывающая квантовую систему, содержащую конечное число связанных кулоновским взаимодействием противоположно заряженных частиц с разными, но сравнимыми по значению массами. При этом, в отличие от ряда исследований, объектом которых являлись системы, подобные экситонным каплям диаметром около 1 мкм [10], в представляемой работе рассматриваются наноразмерные комплексы, содержащие не более 10^2 пар частиц противоположного знака. Целью работы является исследование зависимости физических свойств подобной системы от соотношения масс частиц, в частности, выяснение вопроса, оказываются ли наноразмерные электронно-дырочные системы по своим свойствам ближе к экситонным молекулам, подобным биэкситону [11], или же к макроскопическим экситонным каплям [10].

При проведении расчетов использованы методы нерелятивистской квантовой теории многих тел: приближение Хартри–Фока [16, 17] и приближение

*E-mail: andrei_ipatov@mail.ru

случайных фаз с обменом [18]. В рамках предложенной модели вычислены энергии связи и статические дипольные поляризуемости для ферми-систем, содержащих конечное число пар частиц, при различных соотношениях их масс. При описании свойств исследуемых объектов особое внимание уделено проблеме исключения из спектра возбужденных состояний движения центра тяжести системы.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Рассмотрим систему взаимодействующих фермионов, содержащую равное количество частиц отрицательного и положительного зарядов, связанных между собой кулоновским взаимодействием. Предполагая в дальнейшем использовать полученные результаты, в частности, для описания многоэкситонных комплексов в твердых телах, будем условно называть отрицательные частицы электронами с зарядом $-q$ и массой m_e . Положительные частицы будем называть дырками с зарядом q и массой m_h . Не ограничивая общности, будем считать дырки более тяжелыми частицами, $m_h \geq m_e$, как это обычно имеет место в полупроводниках. При использовании данного подхода для описания электрон-позитронных комплексов массы всех частиц принимаются равными массе свободного электрона, $m_h = m_e = m_0$, а заряд q — равным абсолютной величине заряда электрона, $q = |e|$. В случае многоэкситонных комплексов массы m_h и m_e равны эффективным массам носителей тока соответственно в валентной зоне и в зоне проводимости. Кулоновское взаимодействие заряженных частиц в этом случае оказывается ослабленным в результате поляризации среды, что приводит к эффективному уменьшению заряда частиц, $q^2 = e^2/\epsilon$, где ϵ — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника. Использование статической диэлектрической проницаемости в данном случае обусловлено тем, что масштаб энергий многоэкситонных комплексов соответствует энергии связи экситона Ванье–Мотта, для которого частотной зависимостью диэлектрической проницаемости можно пренебречь [10].

Полная волновая функция основного состояния подобного комплекса, содержащего N частиц каждого вида, с кулоновским потенциалом парного межчастичного взаимодействия в приближении Хартри–Фока записывается в виде произведения двух слэтеровских детерминантов, электронного и дырочного,

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1^{(e)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(e)}, \mathbf{r}_1^{(h)}, \dots, \mathbf{r}_N^{(h)}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left\{ \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}) \right\} \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left\{ \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}) \right\}, \quad (1)$$

составленных из одночастичных функций $\phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)})$ и $\psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)})$ электронов и дырок, являющихся ортонормированными собственными функциями системы связанных уравнений Хартри–Фока [15]

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2 \Delta_i}{2m_e} \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}) + \left[U_H^{(e)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) - U_H^{(h)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) + U_{ex}^{(e)}(\mathbf{r}_i^{(e)}) \right] \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}) &= \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}_i^{(e)}), \\ -\frac{\hbar^2 \Delta_a}{2m_h} \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}) + \left[U_H^{(h)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) - U_H^{(e)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) + U_{ex}^{(h)}(\mathbf{r}_a^{(h)}) \right] \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}) &= \epsilon_a \psi_a(\mathbf{r}_a^{(h)}), \end{aligned} \quad (2)$$

где ϵ_i и ϵ_a — одночастичные энергии электронов и дырок, $U_H^{(e)}$ и $U_H^{(h)}$ — хартриевские потенциалы. В случае системы, имеющей заполненные оболочки, они записываются в виде [18]

$$\begin{aligned} U_H^{(e)}(\mathbf{r}) &= q^2 \int \frac{\rho_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \\ U_H^{(h)}(\mathbf{r}) &= q^2 \int \frac{\rho_h(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь ρ_e и ρ_h — соответствующие распределения плотности электронов и дырок,

$$\begin{aligned} \rho_e(\mathbf{r}) &= 2 \sum_i \phi_i^*(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}), \\ \rho_h(\mathbf{r}) &= 2 \sum_a \psi_a^*(\mathbf{r}) \psi_a(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4)$$

суммирование проводится по всем заполненным одночастичным состояниям.

Нелокальные обменные потенциалы $U_{ex}^{(e)}$ и $U_{ex}^{(h)}$ выражаются как [18]

$$\begin{aligned} U_{ex}^{(e)}(\mathbf{r}) \phi_i(\mathbf{r}) &= -q^2 \sum_j \int \frac{\phi_j^*(\mathbf{r}') \phi_i(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_j(\mathbf{r}), \\ U_{ex}^{(h)}(\mathbf{r}) \psi_a(\mathbf{r}) &= -q^2 \sum_b \int \frac{\psi_b^*(\mathbf{r}') \psi_a(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_b(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5)$$

Для численных расчетов в данной работе были выбраны системы с полностью заполненными оболочками. В этом случае распределения плотности (4) электронов и дырок, а вместе с ними и потенциалы в уравнении Хартри–Фока (2) являются сферически-симметричными. Поэтому одночастичные волновые функции электронов и дырок с угловым моментом l , его проекцией m и проекцией спина μ мо-

гут быть представлены в виде произведения радиальной, угловой и спиновой компонент и характеризуются набором квантовых чисел n, l, m, μ [19]:

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{r}) &\equiv \phi(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{R_{nl}^{(e)}}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\sigma}(\mu), \\ \psi(\mathbf{r}) &\equiv \psi(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{R_{nl}^{(h)}}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{\sigma}(\mu),\end{aligned}\quad (6)$$

где R_{nl} — радиальные функции, Y_{lm} — сферические гармоники.

Полная энергия основного состояния в приближении Хартри–Фока может быть записана в виде

$$\begin{aligned}E_{tot}^{(HF)} &= \sum_i \left(\epsilon_i - \frac{\langle i | U_H^{(e)} - U_H^{(h)} | i \rangle - \langle i | U_{ex}^{(e)} | i \rangle}{2} \right) + \\ &+ \sum_a \left(\epsilon_a - \frac{\langle a | U_H^{(h)} - U_H^{(e)} | a \rangle - \langle a | U_{ex}^{(h)} | a \rangle}{2} \right),\end{aligned}\quad (7)$$

где суммирование вновь проводится по всем заполненным одночастичным состояниям электронной и дырочной подсистем.

Для минимизации энергии кулоновского взаимодействия система стремится к локальной электронной нейтральности, $\rho_e(\mathbf{r}) = \rho_h(\mathbf{r})$ [20]. Это условие, очевидно, строго выполняется в случае электрон-позитронного комплекса [7, 15]. Однако и в случае разных масс электронов и дырок, $m_h \neq m_e$, условие электронной нейтральности электрон-дырочных капель выполняется с хорошей точностью [10]. Таким образом, хартриевские потенциалы в уравнениях (2)–(7) эффективно компенсируют друг друга, и электроны и дырки оказываются связанными между собой практически только обменным взаимодействием [10, 15].

Другой существенный вклад в энергию связи основного состояния системы вносят многочастичные корреляции, в частности, поляризационное взаимодействие [21]. В приближении Хартри–Фока (1)–(5) эти корреляции не учитываются, что приводит к недооценке энергии связи в (7) и не позволяет делать правильные выводы о стабильности основного состояния системы. В работе [22] было продемонстрировано, что включение корреляционного взаимодействия приводит к заметному понижению полной энергии по сравнению с величиной, полученной в приближении Хартри–Фока.

Учет многочастичных корреляций может быть осуществлен в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО) [18, 21]. Для этого прежде всего необходимо построить спектр возбужденных состояний многочастичной системы. В рассматриваемом сферически-симметричном случае в приближении

LS-связи они будут характеризоваться полным угловым моментом L и его проекцией M . В рамках ПСФО волновая функция каждого мультипольного возбуждения $|\Psi_{\nu}\rangle$ представляется в виде суперпозиции одночастичных возбуждений типа частица–вакансия той же мультипольности:

$$\begin{aligned}|\Psi_{\nu}\rangle &= \sum_{im} \left(X_{im}^{(\nu)} \hat{a}_m^{\dagger} \hat{a}_i + Y_{im}^{(\nu)} \hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_m \right) |\Psi_0\rangle + \\ &+ \sum_{as} \left(X_{as}^{(\nu)} \hat{a}_s^{\dagger} \hat{a}_a + Y_{as}^{(\nu)} \hat{a}_a^{\dagger} \hat{a}_s \right) |\Psi_0\rangle.\end{aligned}\quad (8)$$

Здесь $|\Psi_0\rangle$ — основное состояние (1), \hat{a}^{\dagger} и \hat{a} — одночастичные операторы рождения и уничтожения. Здесь и далее индексы « i » и « n » используются для обозначения заполненных и незаполненных одночастичных состояний электронной подсистемы, а индексы « a » и « s » — соответственно для занятых и незанятых состояний дырочной подсистемы. Амплитудные коэффициенты $X_{im}^{(\nu)}$, $X_{as}^{(\nu)}$ (амплитуды «вперед во времени») и $Y_{im}^{(\nu)}$, $Y_{as}^{(\nu)}$ («назад во времени»), определяющие вклад соответствующей пары частица–вакансия в многочастичное возбужденное состояние (8), находятся как компоненты собственных векторов $\mathbf{X}_e^{(\nu)}$, $\mathbf{X}_p^{(\nu)}$ и $\mathbf{Y}_e^{(\nu)}$, $\mathbf{Y}_p^{(\nu)}$ путем решения матричного уравнения ПСФО для двухкомпонентной системы [15]:

$$\mathbf{WZ}^{\nu} = \Omega_{\nu} \mathbf{Z}^{\nu},\quad (9)$$

где

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{(e)} & \mathbf{B}^{(e)} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ -\mathbf{B}^{(e)*} & -\mathbf{A}^{(e)*} & -\mathbf{D}^* & -\mathbf{C}^* \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} & \mathbf{A}^{(h)} & \mathbf{B}^{(h)} \\ -\mathbf{D}^* & -\mathbf{C}^* & -\mathbf{B}^{(h)*} & -\mathbf{A}^{(h)*} \end{pmatrix},\quad (10)$$

$$\mathbf{Z}^{\nu} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_e^{(\nu)} \\ \mathbf{Y}_e^{(\nu)} \\ \mathbf{X}_h^{(\nu)} \\ \mathbf{Y}_h^{(\nu)} \end{pmatrix},$$

Ω_{ν} — собственные числа.

Элементы эрмитовых матриц \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} выражаются через одночастичные энергии ϵ_i , ϵ_a и кулоновские матричные элементы от одночастичных функций, полученных в результате решения уравнений (2):

$$\langle \alpha\beta|V|\gamma\eta\rangle = \delta_{\sigma_\alpha\sigma_\gamma}\delta_{\sigma_\beta\sigma_\eta}q^2 \times \\ \times \int \frac{\varphi_\alpha^*(\mathbf{r})\varphi_\beta^*(\mathbf{r}')\varphi_\gamma(\mathbf{r})\varphi_\eta(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (11)$$

Матрицы \mathbf{A} и \mathbf{B} связывают между собой одночастичные возбуждения внутри электронной и дырочной подсистем, и их вид не отличается от случая стандартного ПСФО для однокомпонентной системы зарядов [18, 21]:

$$\begin{aligned} A_{im,jn}^{(e)} &= \delta_{ij}\delta_{mn}(\epsilon_n - \epsilon_i) + \langle in|U|mj\rangle, \\ A_{as,bt}^{(h)} &= \delta_{ab}\delta_{st}(\epsilon_s - \epsilon_a) + \langle at|U|sb\rangle, \\ B_{im,jn}^{(e)} &= \langle ij|U|mn\rangle, \\ B_{as,bt}^{(h)} &= \langle ab|U|st\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Матричные элементы в (12) включают в себя как прямое (хартриевское), так и обменное взаимодействие:

$$\langle \alpha\beta|U|\gamma\eta\rangle = 2\langle \alpha\beta|V|\gamma\eta\rangle - \langle \alpha\beta|V|\eta\gamma\rangle, \quad (13)$$

где множитель 2 перед прямой компонентой в (13) появляется в результате суммирования по спиновым переменным.

Матрицы \mathbf{C} и \mathbf{D} связывают между собой возбуждения электронной и дырочной подсистем и поэтому содержат только компоненты прямого кулоновского взаимодействия:

$$\begin{aligned} C_{im,as} &= -2\langle is|V|ma\rangle, \\ D_{im,as} &= -2\langle ia|V|ms\rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Знак «-» перед кулоновским матричным элементом в (14) связан с взаимным притяжением электронов и дырок.

Следует обратить внимание на то, что из симметрии матрицы \mathbf{W} в уравнении (9) следует, что для каждого собственного числа Ω_ν с вектором $\{\mathbf{X}_e^{(\nu)}, \mathbf{Y}_e^{(\nu)}, \mathbf{X}_h^{(\nu)}, \mathbf{Y}_h^{(\nu)}\}$ существует соответствующее парное ему решение $-\Omega_\nu$, $\{\mathbf{Y}_e^{(\nu)}, \mathbf{X}_e^{(\nu)}, \mathbf{Y}_h^{(\nu)}, \mathbf{X}_h^{(\nu)}\}$, в силу чего достаточно рассматривать только решения с положительными собственными числами, имеющими смысл энергий переходов между основным состоянием $|\Psi_0\rangle$ и коррелированными возбужденными состояниями $|\Psi_\nu\rangle$ (8).

Если при расчете считать одну из подсистем замороженной, т. е. не учитывать ее возбуждения в суперпозиции (8), то матрица уравнения (10) сводится к одному блоку из матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} , а само уравнение — к стандартному уравнению ПСФО [18, 21].

Необходимо отметить, что общее решение уравнения (10) содержит все возбуждения системы,

включая и движение ее центра масс. Этот тип возбуждений является дипольным, и при непосредственном численном решении уравнения (10) его невозможно отделить от дипольных возбуждений внутреннего движения электронов и дырок в системе их центра масс. Чтобы исключить движение центра масс из спектра возбуждений системы, мы применили метод, основанный на использовании проекционных операторов [22]. Идея метода состоит в переходе от базисного набора одночастичных возбуждений в разложении (8), $|\alpha\beta\rangle = \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta |\Psi_0\rangle$, к новому базису дипольных возбуждений $|\gamma\eta\rangle$, не содержащих движения центра масс системы,

$$|\gamma\eta\rangle = \hat{P}|\alpha\beta\rangle. \quad (15)$$

Здесь \hat{P} — проекционный оператор, матричные элементы которого равны

$$P_{\gamma\eta,\alpha\beta} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\eta} - \frac{P_{\gamma\eta}P_{\alpha\beta}}{Q}, \quad (16)$$

знаменатель

$$Q = \sum_{in} |p_{in}^{(e)}|^2 + \sum_{as} |p_{as}^{(h)}|^2, \quad (17)$$

а одночастичные матричные элементы оператора импульса $p_{\alpha\beta} = \langle \alpha|\hat{p}_z|\beta\rangle$ определены как [18]

$$\begin{aligned} p_{\alpha\beta} &= q\sqrt{(2l_\alpha+1)(2l_\beta+1)} \begin{pmatrix} l_\alpha & 1 & l_\beta \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ &\times \int_0^\infty R_{n_\alpha l_\alpha} \left(\frac{d}{dr} \pm \frac{2l_\alpha+1 \pm 1}{2r} \right) R_{n_\beta l_\beta} dr, \end{aligned} \quad (18)$$

где $l_\beta = l_\alpha \pm 1$. Легко видеть, что преобразование (16) обеспечивает равенство нулю матричных элементов оператора импульса $\langle \gamma\eta|\hat{p}_z|\Psi_0\rangle$.

Волновая функция ν -го дипольного возбужденного состояния $\tilde{\Phi}_\nu$ относительно неподвижного центра масс теперь будет записываться в виде разложения (8), но уже по новому базису одночастичных дипольных возбуждений (16) с новыми амплитудными коэффициентами $\tilde{X}_{im}^{(\nu)}$, $\tilde{Y}_{im}^{(\nu)}$ и $\tilde{X}_{as}^{(\nu)}$, $\tilde{Y}_{as}^{(\nu)}$. Их значения определяются решением системы уравнений, подобной системе (9):

$$\tilde{\mathbf{W}}\tilde{\mathbf{Z}}_\nu = \Omega_\nu\tilde{\mathbf{Z}}_\nu, \quad (19)$$

где матрица $\tilde{\mathbf{W}} = \mathbf{P}\mathbf{W}\mathbf{P}$ получена в результате действия проекционного оператора на исходную матрицу \mathbf{W} (10).

Решение уравнений (9), (19) позволяет вычислить в рамках ПСФО корреляционную поправку к

полной энергии (7) рассматриваемой системы путем суммирования бесконечного числа кольцевых диаграмм [8]. Результат такого суммирования записывается через найденные амплитудные коэффициенты и энергии возбуждений [8]:

$$\Delta E_{corr} = - \sum_{nu} \Omega_\nu \left(\sum_{im} |Y_{im}^{(\nu)}|^2 + \sum_{as} |Y_{as}^{(\nu)}|^2 \right), \quad (20)$$

где при суммировании по дипольным возбужденным состояниям надо использовать амплитудные коэффициенты и энергии возбуждений, полученные из решения уравнения (19) с исключенным движением центра масс.

Полная энергия основного состояния системы с учетом корреляций складывается из хартри-фоковской (7) и корреляционной (20) составляющих:

$$E_{tot} = E_{tot}^{(HF)} + \Delta E_{corr}. \quad (21)$$

Полученный при решении уравнения ПСФО (19) спектр энергий возбужденных состояний и соответствующие волновые функции позволяют описывать процессы, связанные с возбуждением системы под действием различных внешних воздействий. Например, отклик системы на внешнее электрическое поле определяется спектром дипольных возбуждений. Силы осцилляторов f_ν для дипольных переходов между основным и ν -м возбужденным состоянием, энергия которого Ω_ν определяется в результате решения уравнения (10), равны

$$f_\nu = 2\mu D_\nu^2 \Omega_\nu, \quad (22)$$

где μ — приведенная масса электрон-дырочной пары,

$$\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}. \quad (23)$$

Приведенные дипольные матричные элементы D_ν (в калибровке длины), в свою очередь, после отделения угловых частей волновых функций (6) и интегрирования по угловым переменным, вычисляются путем суммирования по всем одночастичным возбуждениям:

$$D_\nu = \sum_{im} (X_{im}^\nu d_{im} + Y_{im}^\nu d_{mi}) - \sum_{as} (X_{as}^\nu d_{as} + Y_{as}^\nu d_{sa}), \quad (24)$$

где $d_{\alpha\beta} = \langle \alpha | z | \beta \rangle$ — одночастичные дипольные амплитуды для пары частица–вакансия с зарядом q :

$$d_{\alpha\beta} = q \sqrt{\frac{(2l_\alpha + 1)(2l_\beta + 1)}{3}} \begin{pmatrix} l_\alpha & 1 & l_\beta \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \int_0^\infty P_{n_\alpha l_\alpha}(r) P_{n_\beta l_\beta}(r) r dr. \quad (25)$$

Силы осцилляторов (22) определяют спектр фотопоглощения системы в дипольном приближении и позволяют вычислить ее статическую дипольную поляризуемость

$$\alpha = \sum_\nu \frac{f_\nu}{\mu \Omega_\nu^2} = \frac{N}{\mu} S_{-2}, \quad (26)$$

где суммирование проводится по всем возбужденным состояниям, а S_k — приведенный k -й момент распределения сил осцилляторов, определенный как

$$S_k = \frac{1}{N} \sum_\nu f_\nu \Omega_\nu^k. \quad (27)$$

В пределе однородной электрон-дырочной жидкости равновесная плотность частиц, а также их энергия определяются условием минимума полной энергии, приходящейся на одну пару частиц, E_{eh} . В силу электронейтральности системы энергия электронно-дырочной жидкости складывается из кинетической, обменной и корреляционной составляющих. Для сравнения с результатами расчетов основного состояния, проведенных в приближении Хартри–Фока, будем рассматривать только сумму кинетической и обменной энергий. Для вырожденного ферми-газа обе эти энергии зависят только от плотности частиц [19]. При численных расчетах удобно выражать среднюю плотность n пар частиц через экситонный радиус $a_0 = \hbar^2 / \mu q^2$ и параметр r_s (приведенный радиус электронно-дырочной пары, т. е. отношение среднего межчастичного расстояния к экситонному радиусу), автоматически учитывая при этом изменение пространственных масштабов при варьировании масс частиц и силовой константы кулоновского взаимодействия q^2 :

$$n = \frac{3}{4\pi(r_s a_0)^3}. \quad (28)$$

Выраженная через r_s энергия пары частиц записывается в виде [10]

$$E_{eh}(r_s) = E_0 \left[\frac{9}{10r_s^2} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{1/3} - \frac{3}{r_s} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \right], \quad (29)$$

где $E_0 = \mu q^2 / 2\hbar^2$ — энергия связи изолированной электрон-дырочной пары (экситона), первый член соответствует кинетической энергии пары частиц, а второй — их обменной энергии. Минимизируя E_{eh} по параметру r_s , получаем значения приведенного равновесного межчастичного расстояния и энергии пары частиц для однородной электрон-дырочной жидкости,

$$r_s^{EHL} = \frac{3\pi}{5} \left(\frac{2\pi}{3} \right)^{1/3}, \quad (30)$$

$$E_{EHL} = E_{eh}(r_s^{EHL}) = -\frac{15}{(2\pi)^2} E_0,$$

что численно дает $r_s^{EHL} = 2.41$ и $E_{EHL} = -0.38E_0$. Эти значения мы и будем использовать при сравнении результатов численных расчетов основного состояния конечного электронно-дырочного комплекса в приближении Хартри–Фока с пределом большой электронно-дырочной капли.

Следует отметить, что $E_{EHL} > E_0$ в приближении, не учитывающем корреляционную энергию, и, таким образом, электрон-дырочная жидкость оказывается неустойчивой по отношению к процессу эмиссии отдельного экситона. Только добавление корреляционного вклада ΔE_{corr} (20) обеспечивает энергию связи электрон-дырочной пары в комплексе конечного размера ниже энергии E_0 изолированного экситона.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Волновая функция и энергия основного состояния, а также спектр возбужденных состояний электрон-дырочного комплекса были получены путем численного решения уравнений Хартри–Фока (2) и ПСФО (9), (19). Для расчетов были выбраны сферически-симметричные системы, содержащие «магические» числа пар, равные $N = 8, 20, 34, 40$, при которых частицы образуют замкнутые оболочки. При проведении расчетов мы приняли $q = |e|$, что не ограничивает общности полученных результатов, так как изменение величины эффективного заряда q приводит к простому переопределению масштабов энергий и координат частиц. Поскольку это же относится и к массам частиц, при исследовании зависимости свойств электрон-дырочного комплекса от отношения масс m_h/m_e мы положили величину m_e равной массе свободного электрона и варьировали массу дырки m_h .

Расчеты основного состояния показали, что во всех рассмотренных комплексах зависимости энергии основного состояния и средней плотности частиц от m_h , m_e и q с хорошей точностью ведут себя подобно предельному случаю большой электронно-дырочной капли, а параметр r_s слабо зависит от отношения масс m_h/m_e и размера комплекса N . Для электронно-дырочного комплекса конечного размера нами было использовано следующее определение параметра r_s , являющееся естественным обобщением его определения для однородной электронно-дырочной жидкости (28):

$$r_s = \left(\frac{4\pi a_0^3}{3N} \int \rho_e(\mathbf{r})\rho_e(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right)^{-1/3}, \quad (31)$$

где ρ_e и ρ_h — плотности электронов и дырок в экситонном комплексе (4). Их радиальные зависимости, полученные в результате самосогласованного решения системы уравнений (2) для ряда комплексов с $N = 8, 20, 34, 40$ и $m_h/m_e = 1, 4$, представлены на рис. 1. При равных массах электронов и дырок ($m_h/m_e = 1$) их плотности, очевидно, совпадают, $\rho_e(\mathbf{r}) = \rho_h(\mathbf{r})$. С увеличением массы дырки m_h растет и величина приведенной массы μ , что приводит к уменьшению радиуса комплекса и увеличению плотностей частиц. При этом радиальное распределение дырочной плотности сжимается несколько быстрее, чем электронной. Это видно также и из приведенных на вставках к рис. 1 зависимостях средних радиусов распределения электронов и дырок от отношения масс частиц. При этом различия средних радиусов и плотностей частиц уменьшаются с ростом размера комплекса. Если пренебречь различием в распределениях плотностей электронов и дырок, то значение среднего радиуса комплекса может быть приближенно определено при всех рассмотренных значениях N соответствующим выражением для однородной капли:

$$\langle r \rangle \approx \frac{3}{4} r_s a_0 N^{1/3}. \quad (32)$$

Полученные с помощью выражения (31) значения r_s как функции числа пар N показаны на рис. 2 для различных значений отношения масс m_h/m_e . С ростом размера экситонного комплекса величина параметра r_s увеличивается, приближаясь к его предельному значению r_s^{EHL} для однородной электронно-дырочной жидкости, причем отклонение от предельного значения увеличивается с ростом массы дырки. Такое поведение r_s соответствует модели электронно-дырочной капли, энергия которой скла-

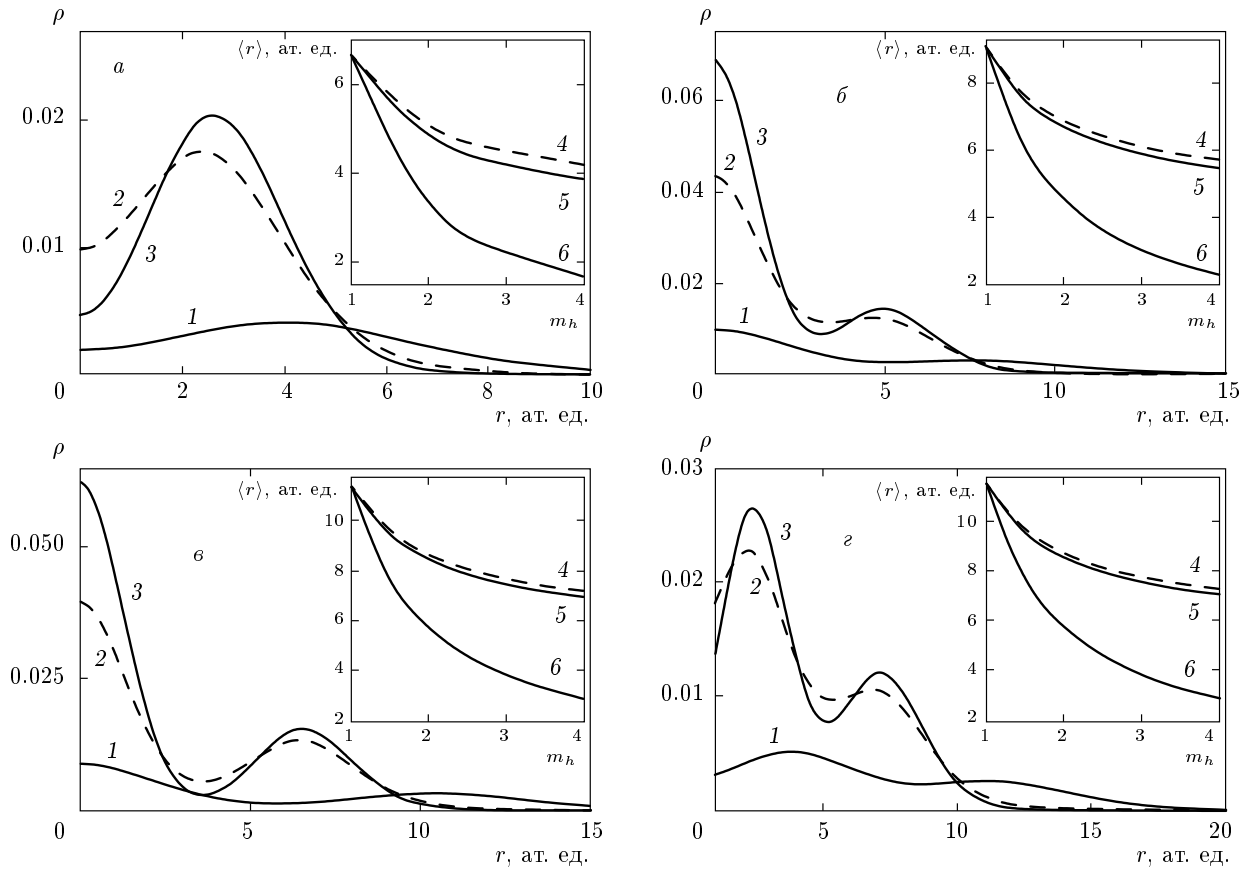


Рис. 1. Распределения плотностей электронов ρ_e и дырок ρ_h для систем, содержащих 8 (а), 20 (б), 34 (в) и 40 (г) пар частиц при $m_e = m_h = m_0$ ($\rho_e = \rho_h$, кривые 1) и при $m_h = 4m_0$, $m_e = m_0$ (ρ_e — кривые 2, ρ_h — кривые 3). На вставках представлены соответствующие зависимости средних радиусов $\langle r_e \rangle$ (4) и $\langle r_h \rangle$ (5) от массы m_h при $m_e = m_0$. Для сравнения приведены зависимости $\langle r \rangle$ от массы частиц при $m_e = m_h$ (6)

дается из объемной энергии (29) и энергии поверхностного натяжения σR^2 ,

$$E(r_s) = NE_{eh}(r_s) + \sigma R^2,$$

где σ — коэффициент поверхностного натяжения, а $R = r_s a_0 N^{1/3}$ — эффективный радиус капли. Минимизируя эту энергию по параметру r_s и полагая поверхностную энергию малой поправкой, получаем

$$r_s^{min} \approx r_s^\infty - \frac{C}{N^{1/3}}, \quad (33)$$

где r_s^∞ — равновесное значение в неограниченной однородной электронно-дырочной жидкости, в приближении Хартри–Фока равно r_s^{EHL} (30), C — численный коэффициент, зависящий от поверхностного натяжения и упругости электронно-дырочной жидкости.

На рис. 2 тонкие сплошные линии показывают аппроксимацию значений r_s , рассчитанных по фор-

муле (31), приближенным выражением (33). Предельное значение $r_s^\infty = 2.45 \pm 0.02$, определенное по результатам аппроксимации, оказалось близким к значению $r_s^{EHL} = 2.41$ (30) в приближении Хартри–Фока. При этом различие численных значений параметра r_s , сосчитанных в соответствии с определением (32), не превышает 10% во всех рассмотренных комплексах. Таким образом, несмотря на неоднородное распределение частиц в наноразмерном экситонном комплексе с $N \gtrsim 10$, их средняя плотность близка к плотности электронно-дырочной жидкости в макроскопической экситонной капле и слабо зависит от соотношения масс частиц.

Это также подтверждается результатами расчетов энергии основного состояния экситонного комплекса, представленных на рис. 3 в зависимости от отношения масс m_h/m_e электронов и дырок. На рис. 3а приведены зависимости от m_h/m_e для энергий наивысших занятых одночастичных уров-

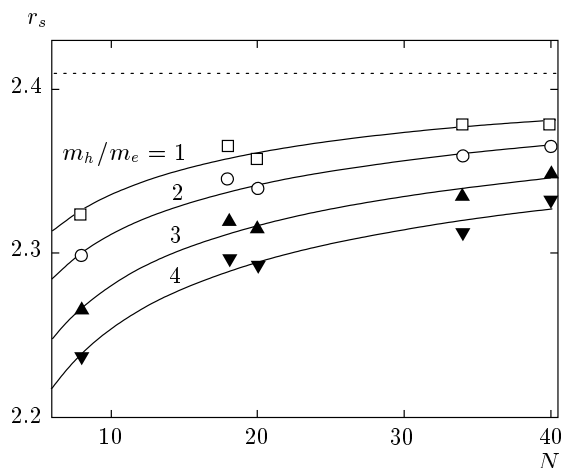


Рис. 2. Значения параметра r_s , полученные в приближении Хартри–Фока (31) для электронно-дырочных комплексов при различных отношениях масс частиц. Тонкие сплошные линии показывают аппроксимацию значений r_s приближенным выражением (33). Пунктиром отмечено равновесное значение r_s^{EHL} (30) для однородной электрон-дырочной жидкости

ней основного состояния, а также потенциалов ионизации I электронной и дырочной подсистем, полученные путем самосогласованного решения уравнений Хартри–Фока (2). Из рис. 3а видно, что потенциалы ионизации, отнесенные к энергии связи свободного экситона, I/E_0 , очень слабо зависят от отношения масс частиц, как это и должно быть в однородной электронно-дырочной жидкости, причем эта зависимость уменьшается с увеличением размера комплекса.

Следует отметить, что потенциалы ионизации обеих подсистем в результате взаимодействия между ними оказались практически равными друг другу во всем исследуемом диапазоне изменения m_h . При этом одночастичные энергии нижележащих состояний существенно различаются. На рис. 3б для примера приведены зависимости от m_h одночастичных энергий электронов и дырок в экситонном комплексе, содержащем 20 пар частиц и имеющем конфигурацию $1s^2 2p^6 2s^2 3d^{10}$ для обеих подсистем. При равных массах все одночастичные энергии электронов и дырок безусловно совпадают. С ростом массы дырок кинетическая энергия электронов увеличивается по сравнению с кинетической энергией дырок пропорционально отношению масс частиц, причем максимальное различие достигается на поверхности Ферми, т. е. для наивысших занятых состоя-

ний. Это изменение кинетических энергий компенсируется нарушением локальной электронейтральности системы. Из рис. 1 видно, что с ростом отношения масс средний радиус электронов становится больше дырочного. В результате внутри экситонного комплекса возникает электростатический потенциал, который понижает электронные энергии и повышает дырочные. Это ведет к выравниванию потенциалов ионизации электронов и дырок, что в пределе однородной электронно-дырочной жидкости соответствует равенству химических потенциалов электронов и дырок. Для нижележащих одночастичных уровней с меньшей кинетической энергией появление электрического потенциала поднимает дырочные уровни над электронными, что и видно на рис. 3б. Отметим, что для большого экситонного комплекса с $N \gg 1$ даже слабое нарушение локальной электронейтральности оказывается достаточно для выравнивания потенциалов ионизации электронов и дырок.

На рис. 3 также приведены зависимости от отношения масс для приведенных полных энергий комплексов E_{tot}/NE_0 , приходящихся на одну пару частиц и рассчитанных как в приближении Хартри–Фока (7), рис. 3в, так и с учетом корреляций (21), рис. 3г. Оказалось, что отнесенные к экситонной энергии E_0 полные энергии электронно-дырочных комплексов слабо зависят от отношения масс. При этом, как и в случае результатов, представленных на рис. 2, эта зависимость ослабевает с ростом размера комплекса. На рис. 3в для примера также пунктиром показана хартри-фоковская энергия E_{EHL} электрон-дырочной пары в однородной жидкости. Видно, что с ростом размера экситонного комплекса его энергия, приходящаяся на одну пару частиц, быстро приближается к асимптотическому пределу для неограниченной однородной электронно-дырочной жидкости.

Сравнение рис. 3в и 3г показывает, что корреляционная поправка к энергии основного состояния ΔE_{corr} (20) вносит существенный вклад, сопоставимый по величине с хартри-фоковской энергией $E_{tot}^{(HF)}$. Энергия комплекса, приходящаяся на одну пару частиц, играет роль энергии связи системы. Тот факт, что в приближении Хартри–Фока она оказывается выше E_0 , означает, что это приближение непригодно для анализа стабильности экситонного комплекса, поскольку в рамках этого приближения система оказывается нестабильной относительно эмиссии отдельных экситонов. В то же время рис. 3г демонстрирует, что полученная с учетом корреляций энергия основного состояния на одну па-

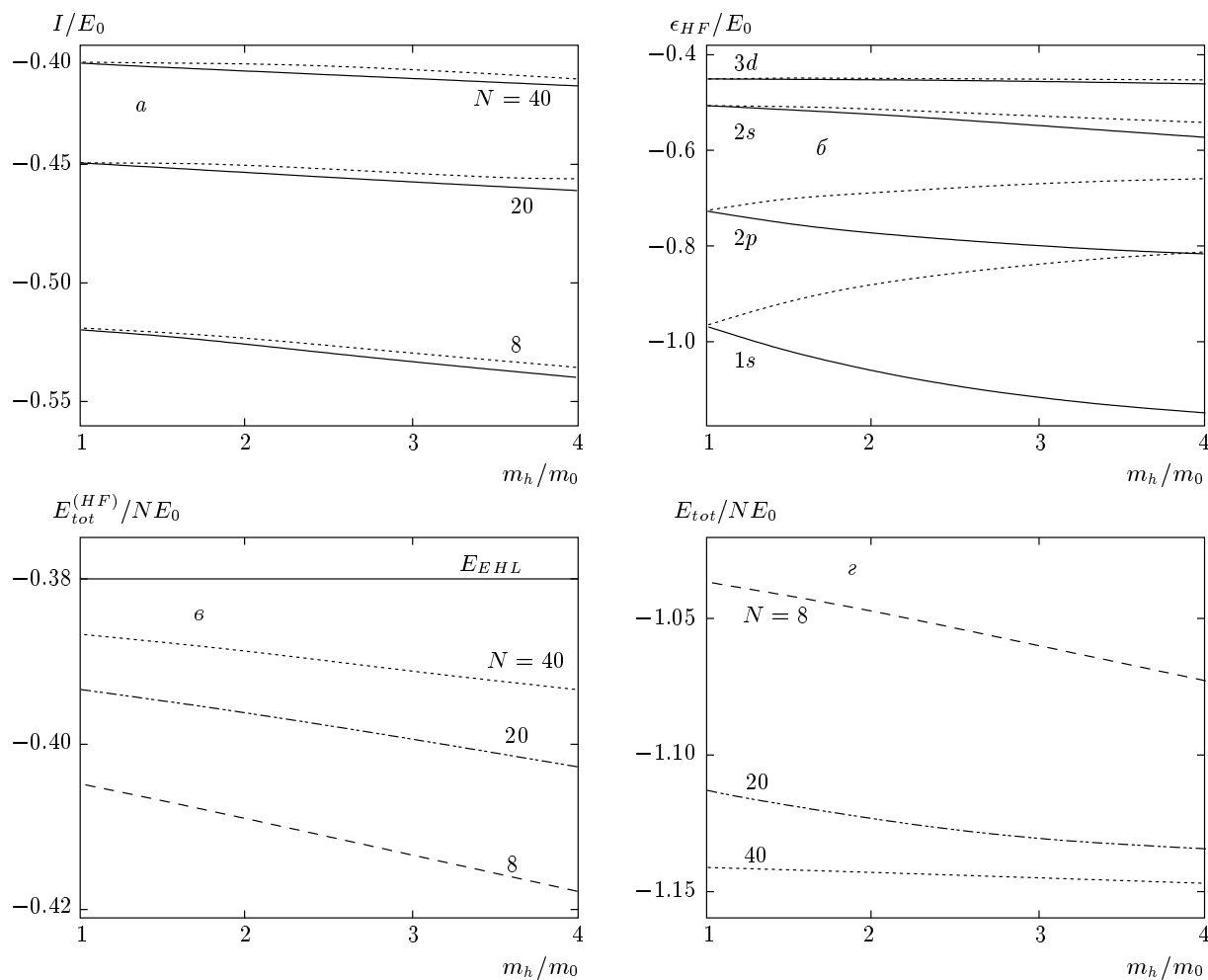


Рис. 3. а) Приведенные потенциалы ионизации I/E_0 электронной (сплошные линии) и дырочной (пунктирные линии) подсистем, содержащих $N = 8, 20, 40$ пар частиц. б) Приведенные одночастичные энергии электронов (сплошные линии) и дырок (пунктирные линии) для системы, содержащей 20 пар частиц в зависимости от массы положительно заряженной частицы m_h при $m_e = m_0$. в, з) Зависимости приведенной полной энергии на одну пару частиц в приближении Хартри-Фока (в) и с учетом корреляций (з) от массы m_h для систем, содержащих 8, 20 и 40 пар частиц

ру частиц во всех рассмотренных комплексах по модулю превосходит E_0 , т. е. комплексы являются стабильными, причем энергия связи увеличивается как с ростом размера комплекса, так и с увеличением отношения масс.

В данной работе мы рассмотрели только экситонные комплексы с магическими числами пар, частицы в которых образуют заполненные квантовые оболочки. Известно, что такие системы обладают наибольшей энергией связи [3, 6, 7, 23]. Вопрос о стабильности несферических экситонных комплексов с числом пар частиц, отличным от магических чисел, остается открытым. Тем не менее очевидно, что сферические экситонные комплексы, обладая макси-

мальной энергией связи и, следовательно, наибольшей стабильностью, должны преобладать в распределении экситонных комплексов по их размерам, как это наблюдается в случае кластеров щелочных металлов [3].

Следует еще раз подчеркнуть, что, несмотря на существенно неоднородное распределение плотности электронов и дырок в экситонном комплексе (см. рис. 1), его основные характеристики, такие как параметр r_s и энергия связи E_{tot}/N , близки к соответствующим значениям для однородной электронно-дырочной жидкости. Таким образом, можно заключить, что уже начиная с $N = 8$ наноразмерные электронно-дырочные системы могут иметь энерге-

тически устойчивые конфигурации и, несмотря на существенные различия во внутренней структуре, проявлять ряд свойств, характерных для однородных экситонных капель.

Этот вывод оказывается справедлив также и в отношении статической дипольной поляризуемости. Нами были проведены расчеты статической дипольной поляризуемости в соответствии с формулой (26) для тех же сферических экситонных комплексов, для которых вычислялись значения средних радиусов $\langle r \rangle$ и энергий E_{tot} . При этом мы исследовали зависимость поляризуемости от отношения масс электронов и дырок, изменяя массу m_h и оставляя величину m_e равной массе свободного электрона m_0 , подобно тому, как это делалось ранее.

Были проведены расчеты статической дипольной поляризуемости (26) для ряда систем, содержащих различное число N пар частиц. Для этого предварительно находилось численное решение матричного уравнения (19). Результаты численных расчетов сравнивались со значениями статической дипольной поляризуемости однородной капли с тем же значением параметра r_s , что и рассматриваемый экситонный комплекс, и содержащей то же число электронно-дырочных пар N . Поляризуемость однородной капли определяется ее радиусом, $\alpha_0 = R^3$, где $R = a_0 r_s N^{1/3}$. В свою очередь, можно выразить α_0 через второй момент распределения сил осцилляторов [8],

$$\alpha_0 = \frac{q^2 \hbar^2 N}{\mu S_2}, \quad (34)$$

и, таким образом, с учетом (26), статическая дипольная поляризуемость экситонного комплекса, отнесенная к соответствующему значению для однородной капли, равна $\alpha/\alpha_0 = \alpha/R^3 = S_2 S_{-2}$. На рис. 4 представлены зависимости приведенной статической дипольной поляризуемости, вычисленные для систем взаимодействующих электронов и дырок α_{e+h}/R^3 (кривые 1), а также отдельно аналогичные зависимости для электронной α_e/R^3 (кривые 2) и дырочной α_h/R^3 (кривые 3) подсистем в поле замороженного остова от массы m_h при фиксированной массе электрона $m_e = m_0$. На рис. 4г представлены зависимости от массы дырки для приведенных поляризуемостей α_{e+h}/R^3 при $N = 2, 8, 20, 40$.

Из рис. 4 видно, что приведенные поляризуемости, сосчитанные в поле замороженного остова, зависят от массы дырки, причем с ростом m_h приведенная поляризуемость более подвижной электронной компоненты увеличивается, а дырочной — уменьшается. Включение динамического взаимодействия

между подсистемами приводит не только к некоторому возрастанию результирующей приведенной поляризуемости всей системы, но и к практическому исчезновению ее зависимости от массы дырки. Поляризация однородной капли с $\alpha_0 = R^3$ возникает в результате простого смещения электронов относительно дырок под действием внешнего электрического поля. Тот факт, что для всех рассмотренных систем выполняется соотношение $\alpha/\alpha_0 > 1$, означает, что поляризация экситонного комплекса сопровождается как смещением электронов и дырок, так и деформацией распределения их плотностей за счет многочастичных корреляций. Из рис. 4 видно, что эффект деформации электронных и дырочных подсистем во внешнем поле оказывается сильнее для комплексов меньшего размера. С ростом N значение α приближается к R^3 . Зависимость отношения α/α_0 от соотношения масс оказывается очень слабой. Это означает, что поляризуемость экситонного комплекса зависит от эффективных масс электронов и дырок, как и α_0 , только через их приведенную массу, $\alpha \propto 1/\mu^3$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовались свойства конечных двухкомпонентных ферми-систем, состоящих из противоположно заряженных фермионов, на примере электрон-позитронных и экситонных комплексов. Были проведены расчеты энергий и плотностей распределения частиц в основном состоянии системы, а также вычислена ее статическая дипольная поляризуемость. Расчеты основного состояния проводились в приближении Хартри–Фока. Многочастичные корреляции, влияние которых в рассматриваемых системах особенно существенно в силу их электронейтральности, учитывались в приближении случайных фаз с обменом. При этом был предложен метод, с помощью которого оказалось возможным исключить вклад движения центра масс системы в спектр ее возбужденных состояний.

Проведенные расчеты энергий основного состояния сферически-симметричных комплексов с полностью заполненными квантовыми оболочками, содержащих магические числа пар частиц 8, 20, 34, 40, доказали их стабильность. Полная энергия системы на пару частиц, играющая роль энергии связи, оказалась во всех рассмотренных комплексах ниже энергии связи изолированной пары частиц. При этом было продемонстрировано, что значительный вклад в энергию связи вносят многочастичные корреляции. Без учета корреляционной компоненты энергия свя-

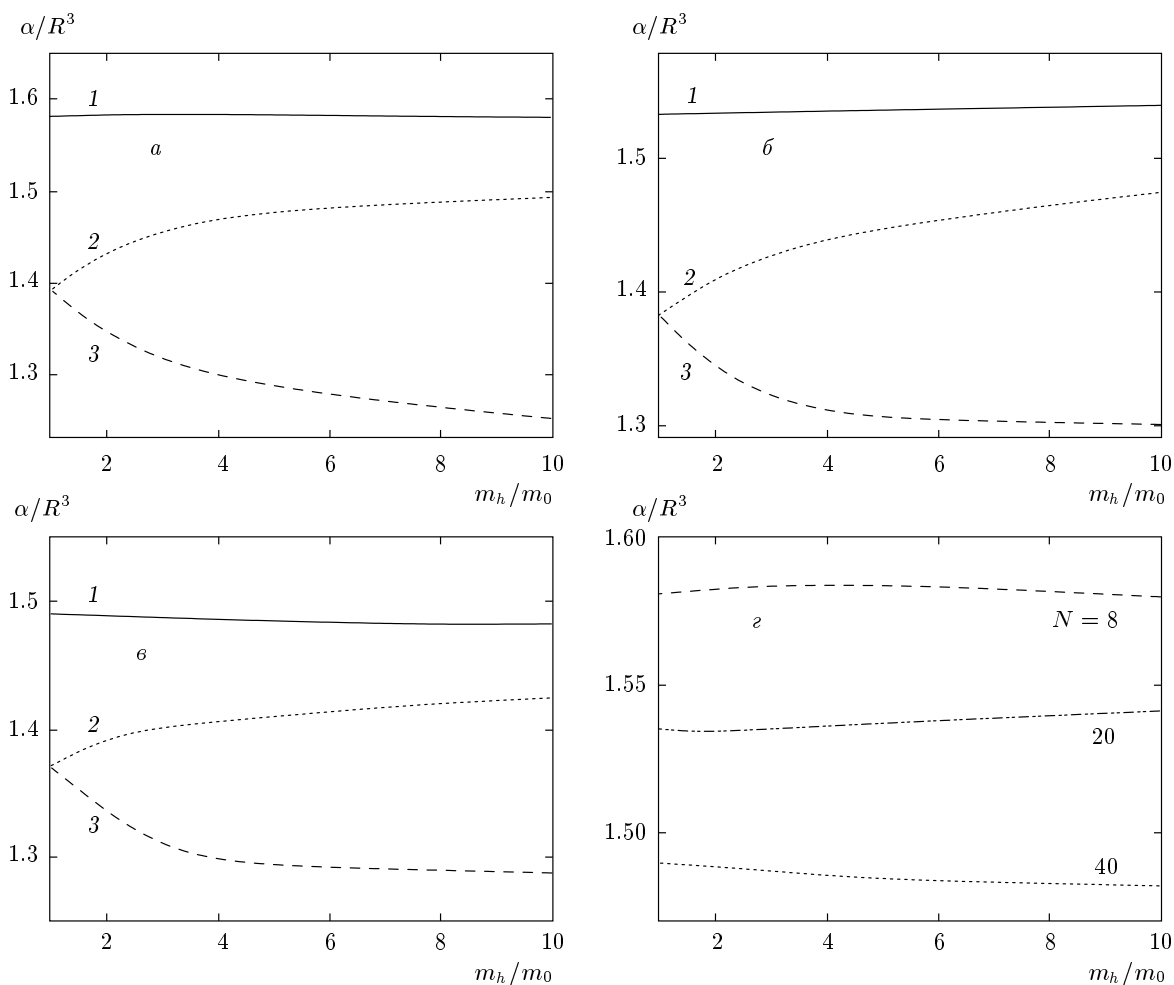


Рис. 4. Зависимости от массы m_h приведенной статической дипольной поляризуемости для конгломератов, содержащих $N = 8$ (а), 20 (б), 40 (в) пар взаимодействующих электронов и дырок α_{e+h}/R^3 (кривые 1), а также отдельно для электронной α_e/R^3 (кривые 2) и дырочной α_h/R^3 (кривые 3) подсистем в поле замороженного остова. з) Приведенные поляризуемости α_{e+h}/R^3 при разных числах пар N

зи пары частиц в системе оказывается выше, чем у изолированной пары, и, таким образом, система оказывается неустойчивой относительно диссоциации отдельных пар частиц.

Были исследованы зависимости свойств основного состояния системы от величин эффективных масс частиц. Вычисления показали, что, несмотря на неоднородность распределения плотности частиц в объеме системы и нарушение ее локальной электронейтральности при различных массах положительно и отрицательно заряженных частиц, ее составляющих, все рассмотренные наноразмерные комплексы проявляют свойства, характерные для макроскопических капель с однородным распределением плотности. Так, при изменении масс частиц системы ее размер меняется пропорционально ра-

диусу изолированной электрон-дырочной (или электрон-позитронной) пары. Это проявляется в поведении ее средней плотности и среднего радиуса, а также поляризуемости. При этом полная энергия и потенциал ионизации комплекса с высокой точностью меняются пропорционально энергии связи изолированной пары частиц, а отклонение от этих зависимостей быстро уменьшается с ростом размера системы.

Таким образом, можно сделать вывод, что предложенная модель доказывает возможность существования наноразмерных кластеров, состоящих из противоположно заряженных фермионов, массы которых могут различаться между собой. При этом оказывается, что, несмотря на неоднородное распределение плотности заряда по объему системы и существенное различие в размерах, подобные ком-

плексы проявляют ряд общих свойств, характерных для однородных электрон-дырочных капель.

В заключение авторы выражают благодарность В. К. Иванову и Р. Г. Полозкову за полезные обсуждения и замечания в ходе работы над этой статьей.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Б. Мигдал, *Теория конечных систем и свойства атомных ядер*, Наука, Москва (1983).
2. *Physics and Chemistry of Small Clusters*, ed. by P. Jena, B. K. Rao, and S. N. Khanna, Plenum Press, New York (1987).
3. U. Kreibitz and M. Vollmer, *Optical Properties of Metal Clusters*, Springer Ser. in Phys., Springer-Verlag, Berlin (1995).
4. M. Brack, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 677 (1993).
5. D. Frenkel and D. Smit, *Understanding Molecular Simulation*, Acad. Press, New York (1996).
6. A. V. Solov'yov, V. K. Ivanov, and R. G. Polozkov, *Eur. Phys. J. D* **40**, 313 (2006).
7. П. И. Яцышин, В. К. Иванов, Р. Г. Полозков, А. В. Соловьев, *Научно-технические ведомости СПбГПУ, Физико-математические науки* вып. 1 (73), 9 (2009).
8. P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*, Springer-Verlag, Berlin (1980).
9. V. O. Nesterenko, Preprint JINR-E4-92-529, Dubna (1992).
10. *Электронно-дырочные капли в полупроводниках*, под ред. Л. В. Келдыша, К. Д. Джеффриса, Наука, Москва (1988).
11. В. Д. Кулаковский, В. Г. Лысенко, В. Б. Тимофеев, *УФН* **147**, 3 (1985).
12. А. А. Рогачев, *ФТТ* **40**, 929 (1998).
13. Т. М. Брагина, В. А. Кособукин, Ю. Г. Шретер, *Письма в ЖЭТФ* **25**, 524 (1977).
14. G. F. Bertsch and R. A. Broglia, *Oscillations in Finite Quantum Systems*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1994).
15. А. Н. Ипатов, *Научно-технические ведомости СПбГПУ, Физико-математические науки* вып. 1 (165), 60 (2013).
16. В. А. Фок, *Начала квантовой механики*, Наука, Москва (1976).
17. Г. Ф. Друкaрев, *Столкновения электронов с атомами и молекулами*, Наука, Москва (1978).
18. М. Я. Амусья, *Атомный фотоэффект*, Наука, Москва (1987).
19. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
20. В. К. Иванов, В. А. Харченко, А. Н. Ипатов, М. Л. Жижин, *Письма в ЖЭТФ* **60**, 345 (1994).
21. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева, *Процессы в многоэлектронных атомах*, Наука, Москва (2006).
22. L. G. Gerchikov, C. Guet, and A. N. Ipatov, *Phys. Rev. A* **66**, 053202 (2002).
23. А. Н. Ипатов, В. К. Иванов, Р. Г. Полозков, *ЖЭТФ* **144**, 727 (2013).