

На правах рукописи



Васильченко Александр Анатольевич

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОЛЛЕКТИВНЫХ ЯВЛЕНИЙ
В ЭЛЕКТРОННЫХ И ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫХ СИСТЕМАХ В
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Краснодар – 2019

Работа выполнена на кафедре радиофизики и нанотехнологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кубанский государственный университет».

Научный консультант:

доктор физико-математических наук,
профессор
Копытов Геннадий Филиппович

Официальные оппоненты:

Вербенко Илья Александрович
доктор физико-математических наук,
директор НИИ физики ФГАОУ ВО «Южный
федеральный университет»

Дерябин Михаил Иванович
доктор физико-математических наук, профессор,
Институт математики и естественных наук
ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный
университет»,
ведущий научный сотрудник

Шеманин Валерий Геннадьевич
доктор физико-математических наук,
Новороссийский политехнический институт
(филиал) ФГБОУ ВО «Кубанский
государственный технологический университет»,
профессор кафедры инженерных дисциплин и
управления

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Национальный исследовательский
Томский государственный университет»

Защита состоится 20 декабря 2019 г. в 14 час. на заседании диссертационного
совета Д 212.101.07 Кубанского государственного университета по адресу:
350040, г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149, ауд. 231.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Кубанского государственного
университета и на сайте www.kubsu.ru.

Автореферат разослан _____ 2019 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.101.07,
доктор физико-математических наук



М.В. Зарецкая

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Исследование низкоразмерных систем в полупроводниках в течение последних десятилетий является одной из наиболее актуальных и интенсивно развивающихся направлений в физике конденсированного состояния. В этой области открыты такие явления, как целочисленный и дробный квантовые эффекты Холла, вигнеровская кристаллизация, переход металл-диэлектрик, квантование проводимости, спиновые капли, осцилляции незатухающего тока и другие явления.

Кроме фундаментального интереса низкоразмерные полупроводниковые структуры могут использоваться для разработки новых уникальных приборов и устройств. В настоящее время полупроводниковые структуры широко используются в самых различных областях: СВЧ-электроника, квантовая электроника, солнечная энергетика и т.д. Современная тенденция к миниатюризации устройств позволяет достичь такого предела, при котором носители зарядов в таких структурах могут рассматриваться как двумерные, одномерные или нульмерные.

В системах с пониженной размерностью межэлектронное взаимодействие играет определяющую роль. Электрон-электронное взаимодействие ответственно за явление дробного квантового эффекта Холла, ширину плато в целочисленном квантовом эффекте Холла, кулоновскую блокаду, переход металл-диэлектрик, спонтанную спиновую поляризацию, “0,7 аномалию” проводимости квантового точечного контакта и т.д. Наиболее впечатляющие результаты по учету электрон-электронного взаимодействия в двумерных квантовых точках получены в работах, в которых численно решалось многочастичное уравнение Шредингера. Точные вычисления показали, что энергетический спектр электронов имеет интересные особенности. В частности, основное и метастабильные состояния многоэлектронной системы в магнитном поле наблюдается только при определенных значениях полного углового момента электронов. В этих работах также показано, что полный угловой момент квантуется, а полный спин электронов имеет немонотонный вид в зависимости от магнитного поля. Однако такой подход требует больших вычислительных затрат и вычисления возможно провести только не более чем для десяти электронов. В настоящее время одним из самых мощных методов учета многочастичного взаимодействия является теория функционала плотности. Проведенные вычисления в рамках теории функционала плотности дали хорошее согласие с точными вычислениями.

Хорошо известно, что в мезоскопических металлических кольцах, помещенных в магнитное поле, может существовать незатухающий ток (persistent current). Это явление было предсказано еще в 30-х годах прошлого века. И только в последние десятилетия удалось экспериментально наблюдать осцилляции незатухающего тока в металлических кольцах. В последние годы этой проблеме посвящено много теоретических и экспериментальных работ. Менее изучены свойства незатухающих токов в полупроводниковых структурах. Также как в металлических кольцах в полупроводниковых квантовых кольцах осцилляции незатухающего тока возникают без учета взаимодействия между электронами. Совсем иная ситуация происходит в квантовых точках, в которых невозможны осцилляции незатухающего тока без учета электрон-электронного взаимодействия. При изменении магнитного поля именно электрон-электронное взаимодействие приводит к изменению угловых моментов электронов и как следствие к осцилляциям незатухающего тока в квантовых точках.

Одной из актуальных тем исследований электронно-дырочных состояний в полупроводниках является исследование электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ). Исследование свойств ЭДЖ в полупроводниках вызывает устойчивый интерес как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения с конца 60-х годов XX века. Свойства трехмерной ЭДЖ достаточно хорошо изучены теоретически и

экспериментально во многих полупроводниках. Ранее было высказано предположение о существовании ЭДЖ в низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах, возникающей вследствие взаимодействия экситонов. Недавно квазидвумерная ЭДЖ обнаружена в полупроводниковых гетероструктурах в системе кремний-германий и слоях кремния. В этих структурах критическая температура ЭДЖ составляет несколько десятков градусов Кельвина. Актуальным является поиск полупроводниковых структур, в которых критическая температура ЭДЖ будет близка к комнатной.

Цель работы

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование влияния взаимодействия носителей заряда, размерных параметров наноструктур, удерживающих потенциалов, магнитного и электрического поля на свойства носителей заряда в квантовых точках, квантовых ямах и квантовых проволоках.

Основные научные задачи работы:

- Определение условий стабильности ЭДЖ в квантовых ямах Si/SiGe.
- Исследование свойств ЭДЖ во внешнем магнитном и электрическом поле.
- Определение условий образования высокотемпературной ЭДЖ в пленках алмаза.
- Исследование электронной структуры двумерных квантовых точек и квантовых колец в магнитном поле.
- Исследование электронной структуры двойных вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле.
- Исследование электронной структуры квантовой проволоки.

При всем разнообразии рассмотренных в диссертационной работе задач, все они связаны с определяющей ролью межчастичного взаимодействия. Для учета этого взаимодействия использовалась теория функционала плотности.

Научная новизна

1. Впервые показано, что ЭДЖ в квантовых ямах может быть многокомпонентной.
2. Впервые показано, что в алмазных пленках критическая температура ЭДЖ близка к комнатной.
3. Создан и реализован на ЭВМ уникальный алгоритм решения уравнений Кона-Шэма для двумерных квантовых точек с большим числом электронов (до тысячи электронов) в сильном магнитном поле
4. Найдены новые серии магических чисел для полного углового момента электронов в вертикально-связанных квантовых точках и объяснена их природа.
5. Впервые в рамках теории функционала плотности показано, что квантовое холловское состояние в двойных квантовых точках при факторе заполнения уровня Ландау, равном единице, является стабильным при нулевой туннельной щели.
6. Впервые в рамках теории функционала плотности показано, что в двойных электронно-дырочных квантовых точках в сильном магнитном поле могут образовываться многочастичные электронно-дырочные комплексы.
7. Впервые аналитически решена задача о переходе электронов в спин-поляризованное состояние в квантовой проволоке.

Достоверность результатов

Все научные выводы обоснованы надежностью применяемых численных и аналитических методов, согласием с результатами, полученными другими авторами.

Достоверность результатов исследований подтверждена хорошим согласием с точными результатами для квантовых точек с небольшим числом электронов и с экспериментальными результатами для ЭДЖ квантовых ямах и проволоках.

Научная и практическая значимость работы

Разработка новых подходов к решению уравнения Шредингера является одной из самых важных задач для современной физики наноструктур. Нами разработан уникальный алгоритм решения нелинейного уравнения Шредингера для двумерных электронов с большим числом электронов (до тысячи электронов). Разработанный алгоритм решения уравнения Шредингера окажется полезным для других областей физики (например, слоистые органические кристаллы и слоистые сверхпроводники), а также в химии и биологии.

В настоящее время для экспериментальных исследований квантовых состояний в основном используют магнито-транспортный и магнито-оптический методы, которые влияют на квантовые состояния. Нами предлагается новый метод, основанный на регистрации незатухающих токов в квантовых точках.

В настоящее время исследования в физике низкоразмерных систем в основном требуют низких температур. Для создания новых квантовых приборов необходимо повышение рабочей температуры. В работе показано, что ЭДЖ в пленках алмаза может формироваться при температуре близкой к комнатной.

Полученные результаты могут быть использованы для создания новых нано и оптоэлектронных приборов, приборов спинтроники на основе квантовых точек и проволок, также квантовые точки могут служить элементной базой квантовых компьютеров.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

1. На основе численных и аналитических решений уравнений Кона-Шэма показано, что в квантовых ямах Si/SiGe/Si при низких концентрациях германия (несколько процентов) образуется трехкомпонентная ЭДЖ. С увеличением содержания германия происходит переход к двухкомпонентной ЭДЖ, причем равновесная плотность электронно-дырочных пар сильно уменьшается. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

2. Получено аналитическое выражение для энергии трехкомпонентной ЭДЖ в магнитном поле. Показано, что в магнитном поле плотность электронно-дырочных пар увеличивается. Зависимости факторов заполнения уровней Ландау от магнитного поля имеют форму плато, т.е. по крайней мере для одного типа носителей заряда часть уровней Ландау полностью заполнена.

3. Показано, что в слоях алмаза толщиной в несколько нанометров ЭДЖ является многокомпонентной и состоит из электронов, тяжелых, легких и спин-орбитально расщепленных дырок. В (111) слоях алмаза равновесная плотность электронно-дырочных пар значительно выше, чем в (100) слоях алмаза. Найдено, что в (111) слоях алмаза критическая температура ЭДЖ близка к комнатной температуре.

4. В квантовой точке в сильном магнитном поле найдены новые серии магических чисел с периодом $\Delta M = N - k$ с $k = 2, 3, 4, 5$. Серии магических чисел связаны с тем, что k электронов имеют компактную конфигурацию и находятся в центре квантовой точки, а остальные электроны также имеют компактную конфигурацию и распределены по кольцу. Вычислена величина незатухающего тока в квантовом кольце в зависимости от магнитного поля. Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока.

5. В координатах величина туннельной щели – напряженность магнитного поля построена фазовая диаграмма перехода в квантовое холловское состояние (КХС) в двойных квантовых точках при факторе заполнения уровня Ландау, равном единице. Показано, что для нулевой туннельной щели КХС может быть стабильным.

6. В рамках теории функционала плотности вычислена энергия двумерного электронно-дырочного комплекса в магнитном поле в зависимости от расстояния между

квантовыми ямами и от числа электронно-дырочных пар. Найдено, что прямые электронно-дырочные комплексы могут содержать большое число электронно-дырочных пар. Показано, что с увеличением межслоевого расстояния число частиц в комплексе уменьшается.

7. Самосогласованно решена система уравнений Кона-Шэма для пространственно разделенных двумерных электронов и дырок в сильном магнитном поле. Вычислена полная энергия электронно-дырочной системы и найдена серия магических чисел для полного углового момента электронов и дырок. Показано, что изменения углового момента носителей заряда с изменением магнитного поля приводят к осцилляциям незатухающего тока электронов и дырок. Незатухающий ток имеет осцилляционный вид с почти линейными сегментами.

8. В координатах ширина квантовой проволоки – критическая плотность построена фазовая диаграмма перехода в спин-поляризованное состояние. Показано, что для квантовых проволок значение одномерной критической плотности, при которой происходит переход в спин-поляризованное состояние, в зависимости от ширины проволоки изменяется слабо. Предложен метод приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера. Аналитически получена оценка величины критической плотности, которая находится в хорошем согласии с точными результатами.

Личный вклад автора в диссертационную работу

Диссертационная работа является результатом многолетней работы автора по исследованию влияния взаимодействия носителей заряда на свойства носителей заряда в квантовых точках, квантовых ямах и квантовых проволоках. Участие автора заключалось в постановке всех задач, анализе полученных результатов, разработке и реализации на ЭВМ алгоритмов решения уравнений Кона-Шэма для квантовых точек, квантовых ям и квантовых проволок. Диссертация является обобщением работ, выполненных автором.

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ (№06-02-96640 р_юг_а, 09-02-96508 р_юг_а, 11-01-96506 р_ц, 13-01-96525 р_юг_а, 16-42-230280 р_юг_а), госзадания Министерства образования и науки РФ (№2.2443.2011).

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы представлены на Международных и Российских конференциях:

VI, VII, IX, X, XI Конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений", Сочи, ИФВД РАН (1999, 2002, 2006, 2008, 2010); I и II Всероссийская конференция Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях, Москва, МИФИ (2008, 2009); XVIII и XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Екатеринбург (2010, 2012); XII международная конференция Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы, Ульяновск, УлГУ, (2010); XXIII и XXIV Международная конференция: Оптика и спектроскопия конденсированных сред, Краснодар, КубГУ, (2017, 2018); 8-ая Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, (2017); Ежегодная конференция грантодержателей регионального конкурса Российского фонда фундаментальных исследований, Краснодар, КубГУ (2006-2018); обсуждались на семинарах в ИПТМ РАН (Черноголовка), ИФТТ РАН (Черноголовка), КубГУ (Краснодар).

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 43 печатных работах. Из них 18 научных статей опубликованы в российских журналах из перечня ВАК, 14 статей индексированы в Web of Science и Scopus.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 190 страниц, включая 90 рисунков и 2 таблицы. Список цитированной литературы содержит 166 ссылок.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, сформулированы цель и вытекающие из нее задачи исследований, показаны научная новизна и практическая значимость работы, сформулированы положения и основные результаты, выносимые на защиту, предоставлена информация об апробации работы, о публикациях и личном вкладе автора, а также приведена структура и краткое содержание диссертации.

В главе 1 изложены основы теории функционала плотности и приведен краткий обзор о точных вычислениях для квантовых точек и представлены экспериментальные результаты для явлений и эффектов, которые исследуются теоретически в диссертации.

Во 2-й главе «**Стабильность квазидвумерной электронно-дырочной жидкости в полупроводниковых структурах**» рассмотрены физические свойства многокомпонентной ЭДЖ в квантовых ямах.

Для вычисления энергии и равновесной плотности трехкомпонентной ЭДЖ используется теория функционала плотности. Полная энергия квазидвумерной ЭДЖ с электронами, легкими и тяжелыми дырками имеет вид:

$$E_t[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = T_e[n_e] + T_h[n_{hh}] + T_l[n_{hl}] + \frac{1}{2} \int V_c(z)(n_e(z) - n_h(z))dz + \int U_e(z)n_e(z)dz + \int U_{hh}(z)n_{hh}(z)dz + \int U_{hl}(z)n_{hl}(z)dz + E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}] \quad (1)$$

где T_e , T_{hh} , T_{hl} – кинетические энергии электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно, $V_c(z)$ – кулоновский потенциал, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия, $U_e(z)$, $U_{hh}(z)$, $U_{hl}(z)$ – внешние потенциалы для электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно, n_e , n_{hh} , n_{hl} – плотности электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно, $n_h = n_{hh} + n_{hl}$.

Внешние потенциалы для электронов и дырок задаются выражением:

$$U_i(z) = \begin{cases} \Delta_i, & |z| \leq d/2 \\ V_i, & |z| > d/2 \end{cases} \quad (2)$$

где d – ширина ямы (барьера), $i=e, hh, hl$.

Величина Δ_i введена для учета расщепления между легкими и тяжелыми дырками. Возьмем $\Delta_e = \Delta_{hh} = 0$, тогда энергия будет отсчитываться от ширины запрещенной зоны полупроводника создающего квантовую яму (барьер). В дальнейшем рассматривается гетероструктура 2 рода, для которой $V_e < 0$, $V_{hh} > 0$ и $V_{hl} > 0$.

Уравнения Кона-Шэма для квазидвумерных электронов и двух типов дырок запишутся в следующем виде:

$$\left(-\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff,i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (3)$$

где $V_{eff,i}(z) = \delta \cdot V_c(z) + V_{xc,i}(z) + U_i(z)$, $\delta=1$ для электронов, $\delta=-1$ для дырок, $V_{xc,i}(z)$ – обменно-корреляционный потенциал.

Здесь и далее используется экситонная система единиц: энергия измеряется в единицах $Ry_{ex} = e^2/2ka_{ex}$, а длина в единицах $a_{ex} = \hbar^2 / \mu e^2$, где μ – приведенная масса, k – диэлектрическая проницаемость.

Электростатический потенциал задается:

$$V_c(z) = 8\pi \int_{-\infty}^z (z-z')[n_h(z') - n_e(z')]dz' , \quad (4)$$

Для учета обменно-корреляционной энергии используется стандартное приближение локальной плотности, тогда обменно-корреляционные потенциалы имеют вид:

$$V_{xc,e}(z) = \frac{d(n_e \varepsilon_{xc})}{dn_e}, \quad V_{xc,hh}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hh}}, \quad V_{xc,hl}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hl}}, \quad (5)$$

$$\text{где } \varepsilon_{xc} = \frac{1}{2} \frac{a + br_s}{c + dr_s + r_s^2}, \quad (6)$$

здесь $r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3}$, $a = -4,8316$, $b = -5,0879$, $c = 0,0152$, $d = 3,0426$.

Для электронейтральной ЭДЖ $N_e = N_{hh} + N_{hl} = N$ (N_i – двумерные плотности носителей заряда). Учитывая, что энергия Ферми дырок равна $E_{F,i} = 2\pi\mu N_i / m_{d,i}$ имеем

$$E_{hh} + \frac{2\pi\mu N_{hh}}{m_{d,hh}} = E_{hl} + \frac{2\pi\mu N_{hl}}{m_{d,hl}} . \quad (7)$$

Из уравнения (7) получаем:

$$N_{hl} = N_e \frac{m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} - \frac{m_{d,hh} m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} \frac{E_{hl} - E_{hh}}{2\pi\mu} . \quad (8)$$

В случае, если из выражения (8) получается $N_{hl} < 0$, тогда необходимо брать $N_{hh} = N_e$ и $N_{hl} = 0$.

В общем случае систему нелинейных уравнений Кона-Шэма (2) – (6) необходимо решать численно. Вначале построим модель, позволяющую получить аналитический результат для энергии квазидвумерной ЭДЖ. Для мелких квантовых ям и ЭДЖ с локальной электронейтральностью пренебрегаем вкладом в энергию (1) внешних потенциалов и кулоновского взаимодействия. Возьмем $\varepsilon_{xc} = -0,91K / r_s$, где $K=1$ без учета электронно-дырочных корреляций (обменная энергия электронов или дырок), и далее будем брать $K=1,3$ (это значение следует из выражения (6) вблизи $r_s \approx 1$). Для каждого типа носителей заряда возьмем волновую функцию с параметром b_i в виде

$$\psi_i(z) = (1/(\pi^{1/2} b_i))^{1/2} \exp(-z^2 / (2b_i^2)) . \quad (9)$$

Разложим $V_{xc,i}(z)$ в ряд и, учитывая только квадратичный член по z , получим из уравнения Шредингера для каждого типа носителей заряда

$$b_i = (1,45\mu^{3/5} / (m_{z,i}^{3/5} K^{3/5} N_i^{1/5})) , \quad (10)$$

$$E_e = -0,95K^{6/5} N_e^{2/5} (m_{z,e} / \mu)^{1/5} , \quad (11)$$

$$E_{hh} = -0,95K^{6/5} N_{hh}^{2/5} (m_{z,hh} / \mu)^{1/5} , \quad (12)$$

$$E_{hl} = -0,95K^{6/5} N_{hl}^{2/5} (m_{z,hl} / \mu)^{1/5} + \Delta_{hl} . \quad (13)$$

Подставляя плотности носителей заряда в уравнение (1), получаем энергию на одну электронно-дырочную пару:

$$E_{eh} = -0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,e}}{\mu}\right)^{1/5} N_e^{2/5} - 0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,hh}}{\mu}\right)^{1/5} \frac{N_{hh}^{7/5}}{N_e} - 0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,hl}}{\mu}\right)^{1/5} \frac{N_{hl}^{7/5}}{N_e} +$$

$$\pi \frac{\mu}{g_e m_{d,e}} N_e + \pi \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{N_{hh}^2}{N_e} + \pi \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{N_{hl}^2}{N_e} + \Delta_{hl} \frac{N_{hl}}{N_e} . \quad (14)$$

В выражении (14) первые три слагаемые соответствуют обменной и поперечной кинетической энергии электронов, легких и тяжелых дырок, следующие три слагаемые –

продольные кинетические энергии электронов, легких и тяжелых дырок, соответственно и последнее слагаемое связано с расщеплением между тяжелыми и легкими дырками.

Рассмотрим ЭДЖ с одним типом дырок. Тогда из выражения (14) находим минимум энергии, которому соответствует равновесная плотность электронно-дырочных пар:

$$N_{eh} = 0,037K^2 \frac{(m_{z,e}^{1/5} + m_{z,h}^{1/5})^{5/3}}{\mu^2(1/g_e m_{d,e} + 1/m_{d,h})^{5/3}}. \quad (15)$$

Из выражения (15) видно, что равновесная плотность относительно слабо зависит от поперечных масс носителей заряда и сильно зависит от числа долин и продольных масс.

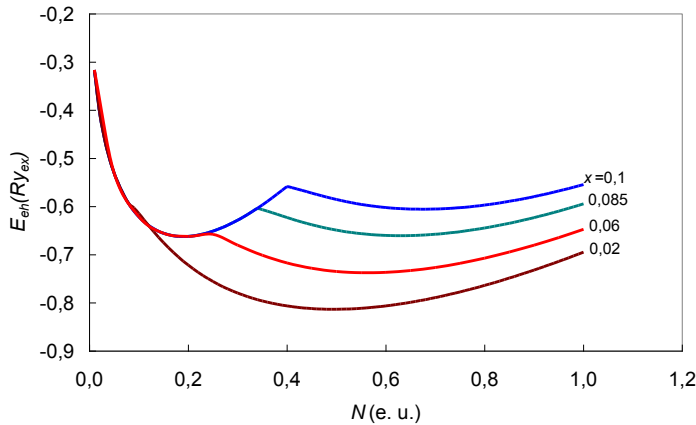


Рисунок 1 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для различных значений x

два минимума, первый минимум при меньших значениях N соответствует ЭДЖ с тяжелыми дырками, а второй – ЭДЖ с легкими и тяжелыми дырками. При $x = 0,085$ значения энергии в первом и втором минимумах совпадают, и при увеличении x основным состоянием ЭДЖ будет состояние с тяжелыми дырками. Отметим, что подобный переход наблюдался и в эксперименте [2].

Для вычисления энергии численно решены нелинейные уравнения Кона-Шэма (2) – (6). Вычисления проведены для структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ с различными ширинами ям (барьеров) и содержанием германия. Энергия отсчитывается от уровней энергии электронов и тяжелых дырок в пустой яме.

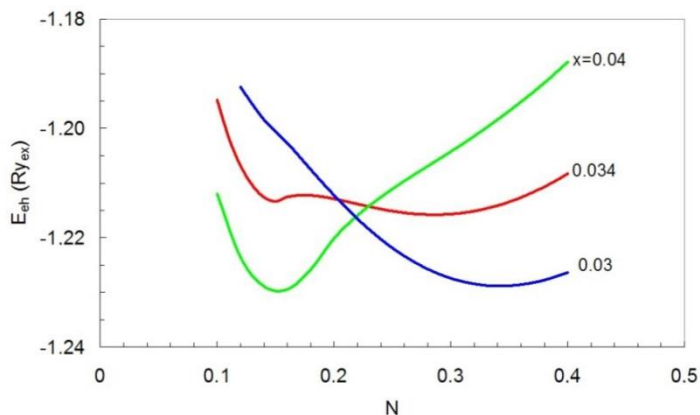


Рисунок 2 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности электронно-дырочных пар при $d = 2$

содержит только тяжелые дырки, во втором – легкие и тяжелые дырки. При увеличении концентрации германия основным состоянием становится первый минимум, при этом

На рисунке 1 приведены результаты вычислений по формуле (14) для структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. Для вычислений использовались следующие параметры: $\Delta_{hl} = 16,6x$, $g_e = 4$, $g_{hh} = g_{hl} = 1$, $m_{z,e} = 0,198m_0$, $m_{d,e} = 0,44m_0$, $m_{z,hh} = 0,28m_0$, $m_{d,hh} = 0,2m_0$, $m_{z,hl} = 0,18m_0$, $m_{d,hl} = 0,25m_0$ (m_0 – масса свободного электрона). При $x = 0,02$ ЭДЖ содержит два типа дырок, и минимум энергии соответствует $N = 0,5$. Рассчитанная величина равновесной плотности неплохо согласуется с экспериментальными результатами [1, 2]. С увеличением x появляется

Результаты, представленные на рисунке 2, показывают, что в мелких квантовых ямах (низкая концентрация германия) образуется трехкомпонентная ЭДЖ, состоящая из электронов, тяжелых, и легких дырок. С увеличением содержания германия происходит переход от трехкомпонентной к двухкомпонентной ЭДЖ. Интересные особенности вблизи этого перехода возникают в зависимости энергии от плотности электронно-дырочных пар. В зависимости энергии от плотности появляются два минимума, в первом из них ЭДЖ

плотность электронно-дырочных пар сильно уменьшается. Переход в двухкомпонентное состояние связан не только с увеличением расщепления уровней энергии между легкими и тяжелыми дырками, но и с увеличением энергии легких дырок во внешнем потенциале.

Результаты вычислений для структур с различными ширинами квантовых ям приведены на рисунке 3. Видно, что с уменьшением ширины квантовых ям переход к двухкомпонентной ЭДЖ происходит при большем значении концентрации германия. Причина такой зависимости от ширины квантовой ямы связана с более сильным влиянием внешнего потенциала на расстояние между уровнями энергии тяжелых и легких дырок при малых d в мелких квантовых ямах.

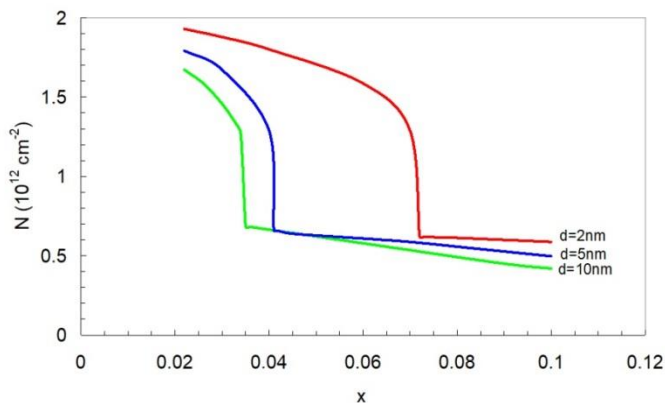


Рисунок 3 – Зависимость равновесной плотности электронно-дырочных пар от концентрации германия в слое SiGe

что в структуре с $d = 2$ нм и $x = 0,09$, по-видимому, образуется двухкомпонентная квазидвумерная ЭДЖ. Результаты вычислений для такой структуры (рисунок 3) дают $N = 6 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, что неплохо согласуется с экспериментом [4].

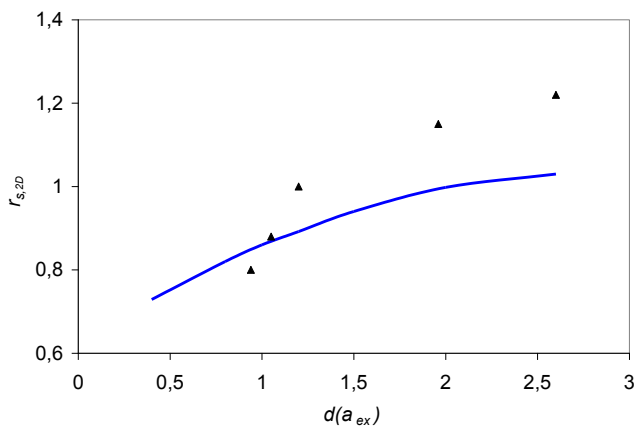


Рисунок 4 – Зависимость параметра $r_{s,2D}$ от ширины ямы. Сплошная линия – численный расчет, треугольники – эксперимент [5].

экспериментальная [5] (треугольники) зависимость равновесной плотности (в единицах $r_{s,2D} = 1/(\pi N)^{1/2}$) от ширины ямы. Расчеты и эксперимент выполнены для поверхности кремния (100). Видно, что теория дает достаточно хорошее согласие с экспериментальными результатами.

Актуальным является поиск полупроводниковых структур, в которых критическая температура ЭДЖ будет близка к комнатной. Одной из таких структур являются пленки

Учет в расчетах наличия в ЭДЖ легких и тяжелых дырок приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными. Действительно в работе [3] показано, что при $d = 5$ нм и $x < 0,05$ существует трехкомпонентная ЭДЖ, что неплохо согласуется с результатами расчетов. Экспериментальное значение равновесной плотности электронно-дырочных пар для трехкомпонентной ЭДЖ $N = 1,6 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$ [3] при $d = 5$ нм хорошо согласуется с вычисленными значениями (рисунок 3). В работе [4] показано,

В работе [5] экспериментально показана возможность образования ЭДЖ в квантовых ямах $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ и подробно исследованы ее свойства в зависимости от ширины квантовой ямы. На основе уравнений Кона-Шэма (2) – (6) для двухкомпонентной ЭДЖ проведены расчеты для квантовых ям $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ различной ширины и найдено, что с увеличением ширины квантовых ям энергия связи и равновесная плотность уменьшаются.

На рисунке 4 приведена расчетная (сплошная линия) и

алмаза толщиной в несколько нанометров. Уравнения Кона-Шэма (2) – (6) легко обобщаются на четырехкомпонентную ЭДЖ в пленках алмаза. Аналитическими и численными методами показано, что в пленках алмаза возможно образование многокомпонентной ЭДЖ, которая содержит электроны, тяжелые, легкие и спин-орбитально расщепленные дырки. Проведенные вычисления показали, что наибольшая плотность электронно-дырочных пар и наименьшая энергия пар наблюдается в (111) в пленках алмаза. Равновесная плотность электронно-дырочных пар увеличивается примерно в 3 раза по сравнению с плотностью в (100) пленке алмаза. Увеличение равновесной плотности электронно-дырочных пар и уменьшение энергии ЭДЖ в основном связано с уменьшением кинетической энергии электронов.

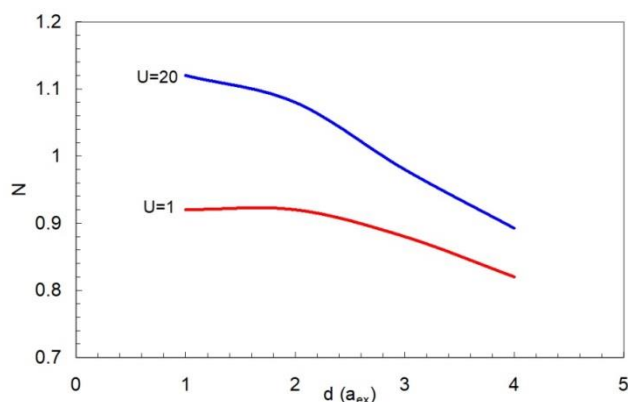


Рисунок 5 – Зависимости плотностей электронно-дырочных пар от ширины квантовой ямы для (111) пленки алмаза

получаем трехмерную плотность электронно-дырочных пар $n \approx N/d = 1,1 (4,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3})$. Эта величина плотности более чем в четыре раза превосходит плотность трехмерной ЭДЖ, поэтому следуя работе [6] получим для ЭДЖ в пленке алмаза критическую температуру $T_c = 270 \text{ К}$. Оценка критической температуры проведена для трехмерной модели. Для квазидвумерной ЭДЖ критическая температура может быть выше, чем для трехмерной ЭДЖ [5].

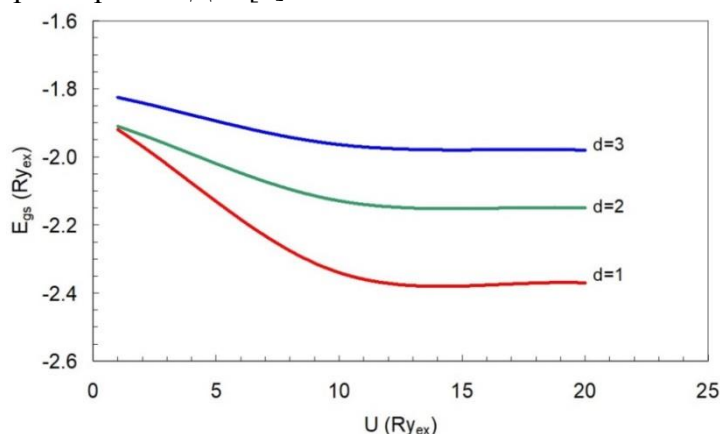


Рисунок 6 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от глубины потенциальных ям для (111) пленки алмаза.

На рисунке 5 показаны зависимости плотностей электронно-дырочных пар от ширины квантовой ямы при глубине квантовых ям $U = 1$ и $U = 20$. Равновесная плотность уменьшается с увеличением d или уменьшением U . Такая зависимость связана с уменьшением роли обменно-корреляционного взаимодействия при больших d и малых U . ЭДЖ является четырехкомпонентной, например при $d = 1$ и $U = 20$ плотности дырок $N_{hh} \approx 0,73$, $N_{hl} \approx 0,27$, $N_{so} \approx 0,12$. Для алмазной пленки с толщиной $d = 1$ и $U = 20$

получаем трехмерную плотность электронно-дырочных пар $n \approx N/d = 1,1 (4,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3})$. Эта величина плотности более чем в четыре раза превосходит плотность трехмерной ЭДЖ, поэтому следуя работе [6] получим для ЭДЖ в пленке алмаза критическую температуру $T_c = 270 \text{ К}$. Оценка критической температуры проведена для трехмерной модели. Для квазидвумерной ЭДЖ критическая температура может быть выше, чем для трехмерной ЭДЖ [5].

На рисунке 6 показаны зависимости энергии на одну электронно-дырочную пару от глубины потенциальных ям для различных ширин квантовых ям. Величина энергии основного состояния может достигать значения $E_{gs} = -2,4 (-220 \text{ мэВ})$, что значительно меньше величины энергии трехмерной ЭДЖ, -130 мэВ [7]. В объемных полупроводниках критическую температуру ЭДЖ можно оценить как $T_c = 0,1 |E_{gs}| / k_B$ [7]. Используя это выражение для пленок алмаза, получаем $T_c = 260 \text{ К}$.

Представляет интерес исследовать свойства квазидвумерной ЭДЖ в магнитном поле. Рассмотрим трехкомпонентную ЭДЖ в магнитном поле B , перпендикулярном плоскости

жидкости. В отличие от трехмерной ЭДЖ в квазидвумерном случае энергия носителей заряда имеет дискретные значения энергии:

$$E_k = E_0 + (k + 1/2)\hbar\omega_c, \quad (15)$$

где E_0 – уровень энергии поперечного квантования, ω_c – циклотронная частота, $k = 0, 1, 2, \dots$

Для простоты пренебрегаем спиновым и долинным расщеплением, тогда максимальная плотность носителей на одном уровне Ландау запишется как

$$N_{0,i} = 2g_i eB / h, \quad (16)$$

где g_i – число долин для i -го типа носителей заряда, $i = e, hh, hl$.

В экситонной системе единиц циклотронная энергия имеет вид:

$$E_{c,i} = \frac{\mu}{m_{d,i}} \frac{2}{L^2}, \quad (17)$$

где $m_{d,i}$ – масса плотности состояний, $L = 25.66 / (\sqrt{B} a_{ex})$ – магнитная длина, a_{ex} – экситонный радиус в нанометрах.

Продольная энергия i -го типа носителей заряда запишется:

$$E_{c,i} = \frac{\mu}{m_{d,i}} \frac{1}{L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,i}} (2k + 1) N_{i,k}, \quad (18)$$

где $k_{m,i} = \text{int}(N_i / N_{0,i})$, $\text{int}(a)$ – целая часть числа a , $N_{i,k} = N_{0,i}$ при $k < k_{m,i}$, $N_{i,k_{m,i}} = N_i - k_{m,i} N_{0,i}$.

Считаем, что магнитное поле влияет только на продольное движение носителей заряда. Тогда для вычисления энергии электронно-дырочных пар можно использовать выражение (14), заменив продольную кинетическую энергию носителей заряда на энергию носителей заряда в магнитном поле (18). Таким образом, энергия на одну электронно-дырочную пару запишется в виде:

$$E_{eh} = -0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,e}}{\mu} \right)^{1/5} N_e^{2/5} - 0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,hh}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hh}^{7/5}}{N_e} - 0,69K^{6/5} \left(\frac{m_{z,hl}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hl}^{7/5}}{N_e} +$$

$$\frac{\mu}{m_{d,e}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,e}} (2k + 1) N_{e,k} + \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,hh}} (2k + 1) N_{hh,k} + \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,hl}} (2k + 1) N_{hl,k}, \quad (19)$$

где $K = 1,3$, $m_{z,i}$ – поперечная масса, N_i – двумерные плотности носителей заряда, $N_e = N_{hh} + N_{hl}$.

В выражении (19) первые три слагаемых взяты из выражения (14) и каждое из них соответствует сумме поперечной кинетической и обменной энергии электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно.

Вычисления проводились для структуры $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. Результаты расчетов по формуле (19) показали, что в магнитном поле $B < 1$ Тл зависимость энергии электронно-дырочной пары от плотности носителей имеет такой же вид, как и при нулевом магнитном поле. Этот результат связан с тем, что в низких магнитных полях число заселенных уровней Ландау велико и носители ведут себя почти как свободные. С увеличением магнитного поля проявляется влияние магнитного поля на зависимость $E_{eh}(N)$. На рисунке 7 видны изломы в энергии, которые связаны с переходами носителей заряда на следующий уровень энергии. Например, для $B = 5$ Т минимум энергии достигается при $N = 0,24$, а соседние изломы разделены интервалом $N_{0,hh} = 0,12$, который соответствует плотности тяжелых дырок полностью заполненного уровня Ландау. Отметим, что равновесная плотность электронно-дырочных пар в магнитном поле $B = 5$ Т увеличивается примерно в 1,3 раза по сравнению с плотностью в нулевом магнитном поле.

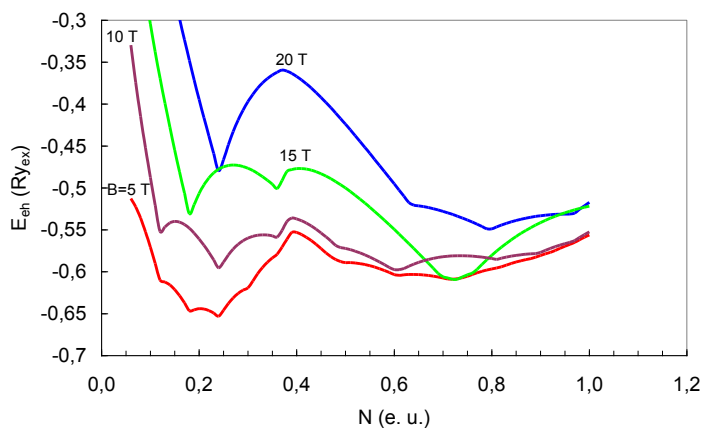


Рисунок 7 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар при $x = 0,1$

и тяжелыми дырками. При $B > 10,3$ в основном состоянии ЭДЖ состоит из электронов, легких и тяжелых дырок, причем плотность электронно-дырочных пар увеличивается с увеличением магнитного поля. Отметим, что изменяя магнитное поле можно управлять переходом между трехкомпонентной и двухкомпонентной ЭДЖ. Вычисления, проведенные для больших значений x показали, что многокомпонентная ЭДЖ возникает при большем значении магнитного поля. Например, при $x = 0,12$ значение магнитного поля B_c , выше которого трехкомпонентная ЭДЖ становится стабильной, равно $15,1$ Т, а при $x = 0,14$ – $B_c = 30,5$ Т.

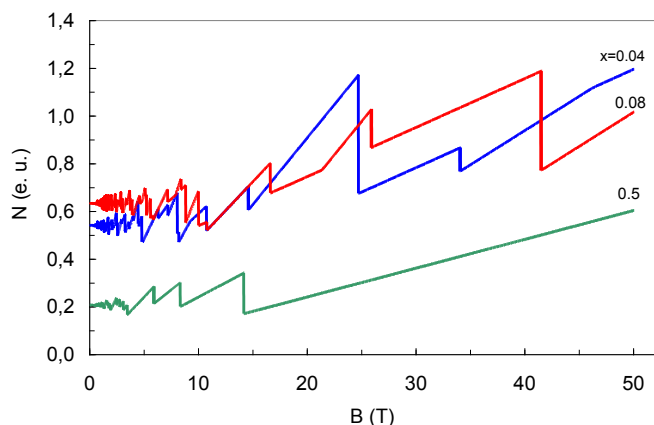


Рисунок 8 – Зависимость плотности электронно-дырочных пар от магнитного поля

полностью заполненному уровню Ландау. Например, при $x = 0,04$ скачок плотности вблизи 25 Т соответствует переходу из состояния с фактором заполнения $\nu_{hh} = 2$ в состояние с $\nu_{hl} = 1$. При $x = 0,5$ ЭДЖ является двухкомпонентной и при $B > 14,5$ электроны и тяжелые дырки находятся на нижнем уровне Ландау. Отметим, что в рассматриваемом диапазоне магнитных полей плотность электронно-дырочных пар увеличивается в два раза для трехкомпонентной ЭДЖ и почти в три раза для двухкомпонентной.

В 3-ей главе «Исследование свойств двумерных электронов в сильном магнитном поле» исследуются электронные свойства двумерных квантовых точек в перпендикулярном магнитном поле с помощью теории функционала плотности.

Полная энергия многоэлектронной системы во внешнем потенциале $V_{ext}(r)$ есть однозначный функционал плотности электронов $n(r)$:

В нулевом магнитном поле переход от трехкомпонентной ЭДЖ к двухкомпонентной происходит при $x = 0,08$. Магнитное поле может стабилизировать ЭДЖ с тремя типами носителей заряда при значениях $x > 0,08$. Из результатов, представленных на рисунке 7, видно, что при $B = 10$ Т кривая зависимости энергии электронно-дырочной жидкости имеет два минимума, причем значения минимумов почти равны. Первый минимум при меньшем значении N соответствует ЭДЖ с тяжелыми дырками, а второй – ЭДЖ с легкими

На рисунке 8 приведены зависимости двумерных плотностей электронно-дырочных пар от магнитного поля при различных значениях x . При низких магнитных полях видны осцилляции плотности, связанные с изменением заселенностей уровней Ландау. Линейные зависимости плотности от магнитного поля связаны с тем, что в основном состоянии всегда есть полностью заполненный носителями заряда уровень Ландау. Резкие скачки в плотности соответствуют переходу к новому

$$E[n] = T[n] + E_{ext}[n] + E_H[n] + E_{xc}[n], \quad (20)$$

где $T[n]$ — кинетическая энергия невзаимодействующих электронов в магнитном поле напряженности B , которое задается векторным потенциалом $A=B(-y/2, x/2, 0)$.

Второе слагаемое в выражении (20) связано с внешним взаимодействием и в двумерном случае задается выражением

$$E_{ext}[n] = \int V_{ext}(r)n(r)dr, \quad (21)$$

$$\text{где } V_{ext}(r) = 2 \int_0^R \frac{n_p}{|r-r'|} dr' - \frac{2z_0}{r}. \quad (22)$$

Используем атомную систему единиц, в которой энергия выражается в единицах $Ry = e^2/(2\epsilon a_B)$, а длина в единицах $a_B = \epsilon \hbar^2/(m_e e^2)$, где m_e — эффективная масса электрона, ϵ — диэлектрическая проницаемость. Все вычисления будут проведены для двумерных квантовых точек на основе GaAs, для которого $\epsilon = 12,4$ и $m_e = 0,067m_0$ (m_0 — масса свободного электрона). Для GaAs получаем $a_B = 9,8$ нм, $Ry = 5,9$ мэВ.

Внешний потенциал $V_{ext}(r)$ создается примесью с зарядом z_0 и положительно заряженным диском радиуса R и с двумерной плотностью заряда n_p . Для квантовых точек с N электронами величина R находится из условия электронейтральности $n_p \pi R^2 = N$. Во многих работах удерживающий потенциал от положительно заряженного фона (первое слагаемое в формуле (22)) заменяется параболическим потенциалом, равным $V(r) = \omega_0^2 r^2/4$.

Варьируя энергию (20) и учитывая круговую симметрию, получаем уравнения Кона-Шэма для спин-поляризованных электронов

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{4L^4} + \frac{m^2}{r^2} - \frac{m}{L^2} + V_{eff}(r) \right\} \psi_m(r) = E_m \psi_m(r), \quad (23)$$

с эффективным одночастичным потенциалом

$$V_{eff}(r) = V_H(r) - V_{H,m}(r) + 2\alpha(n(r) - n_m(r)) + V_{ext}(r), \quad (24)$$

где m - угловой момент электрона, $n_m(r) = |\psi_m(r)|^2$, $n(r) = \sum_{occ m} n_m(r)$, $\alpha = -\sqrt{2\pi} \pi L$.

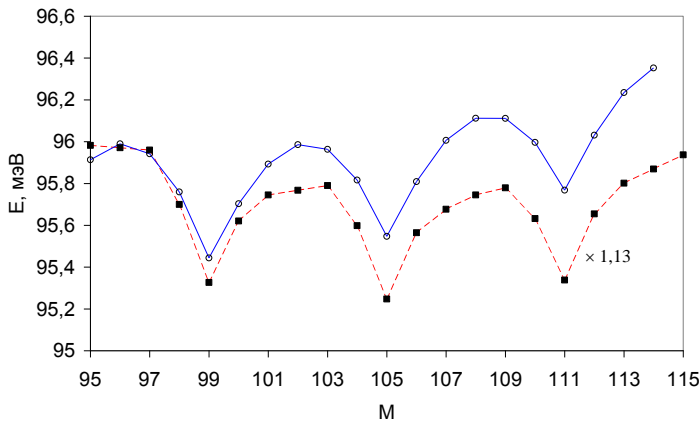


Рисунок 9 – Зависимость энергии от суммарного углового момента всех электронов ($N=7$, $B = 18,8$ Тл, $\hbar\omega_0 = 3$ мэВ). ■ — точный результат [9], ○ — численный расчет. Энергия отсчитывается от величины $(\omega_0^2 + 1/L^4)^{1/2}$. Точки соединены линиями для наглядности

числа и период $\Delta M = N-1$, как и в точных вычислениях. В одночастичном приближении это означает, что один электрон находится в центре квантовой точки, а остальные распределены по кольцу.

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решалась численно. Проведено сравнение полученных результатов с точными результатами [8, 9]. На рисунке 9 результаты расчетов сопоставляются с точными результатами, полученными в работе [9]. Видно, что величина энергии, вычисленная с помощью ТФП, приблизительно на 13% больше точной величины, а положения минимумов энергии совпадают. Отметим, что учет корреляционной энергии уменьшает полную энергию и различие между результатами будет меньше. Самое главное, что получены такие же магические

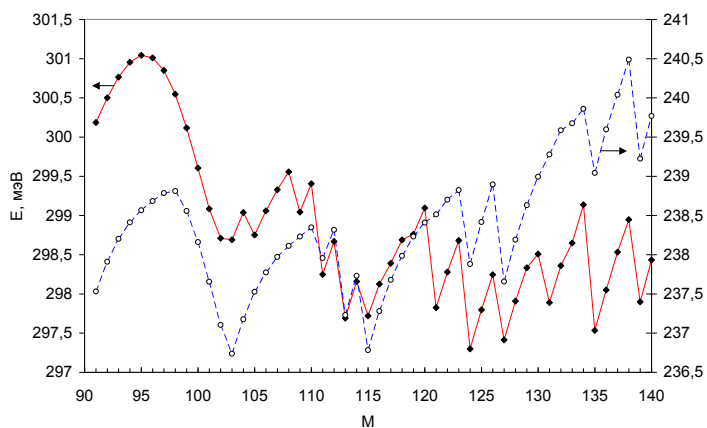


Рисунок 10 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента всех электронов ($N=14$, $B = 4$ Тл, $\hbar\omega_0 = 2$ мэВ). ■ — $z_0=0$; ○ — $z_0 = 1$. Точки соединены линиями для наглядности

$N = 14$. Появились новые серии магических чисел, а именно: $\{103, 115, 127, 139\}$ (соответствуют периоду $\Delta M = N - 2$), $\{113, 124, 135\}$ ($\Delta M = N - 3$), $\{111, 121, 131\}$ ($\Delta M = N - 4$), $\{109\}$ ($\Delta M = N - 5$). Основное состояние в случае $z_0=0$ для параметров, указанных на рисунке 10, наблюдается при $M = 124$. В этом случае три электрона локализованы в центре квантовой точки, а остальные распределены по кольцу. С повышением напряженности магнитного поля основным состоянием станет состояние с $M = 127$, которое имеет два электрона в центре квантовой точки. Отметим, что разность энергий (щель) между этими состояниями составляет около одного градуса Кельвина. Также на рисунке 10 показано влияние положительно заряженной примеси на электронную структуру квантовой точки с $N = 14$. Видно, что примесь изменяет наборы магических чисел. Исчезают локальные минимумы при $M = 105, 109, 121, 131$, а основное состояние сдвигается в сторону меньшего полного углового момента. Таким образом, видно, что примеси сильно влияют на электронную структуру квантовой точки. Возможно, подобное влияние и приводит к исчезновению дробного квантового эффекта Холла в “грязных” полупроводниках.

Для квантовых колец в качестве внешнего потенциала возьмем параболический удерживающий потенциал с радиусом кольца r_0 :

$$V_{ext}(r) = \frac{\omega_0^2}{4}(r - r_0)^2. \quad (25)$$

Проведенные численные расчеты показали, что в случае $\Delta M = N$ зависимость полного углового момента от магнитного поля (рисунок 11) представляет собой серию плато углового момента электронов, разделенных высотой N . Причем середины всех плато B_i близки к прямо-пропорциональной зависимости от напряженности магнитного поля:

$$B_i = cM, \quad (26)$$

где c – константа, $i = 1, 2, \dots$

Учитывая, что $M = N(N-1)/2 + pN$ ($p = 0, 1, 2, \dots$) из выражения (26) получим для ширины плато:

$$\Delta B = \frac{2B_1}{N+1}, \quad (27)$$

где B_1 соответствует середине первого плато с $M = N(N-1)/2 + N$.

С увеличением числа электронов (расчеты проводились для квантовых точек с числом электронов до 17) появляются новые серии магических чисел. В результате проведенных вычислений найдены новые серии магических чисел с периодом $\Delta M = N - k$ с $k = 2, 3, 4, 5$. Серии магических чисел связаны с тем, что k электронов имеют компактную конфигурацию и находятся в центре квантовой точки, а остальные электроны также имеют компактную конфигурацию и распределены по кольцу. На рисунке 10 приведены результаты вычислений для квантовой точки с

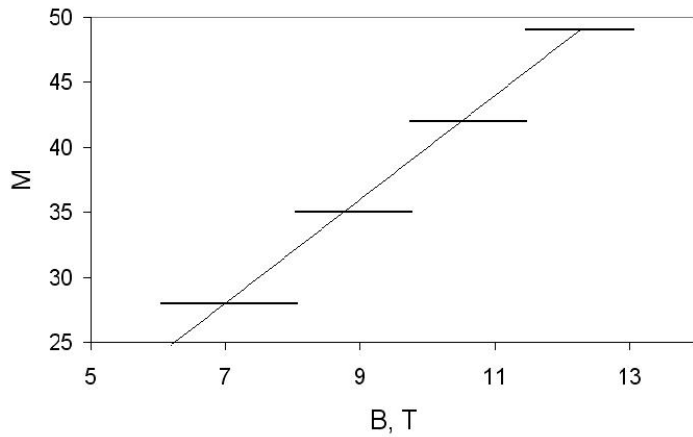


Рисунок 11 – Зависимость полного углового момента электронов от магнитного поля ($N=7$, $\hbar\omega_0 = 4$ мэВ, $r_0 = 1$). Прямая линия соответствует формуле (26)

момента возрастает с периодом $N = 7$. Период осцилляций незатухающего тока хорошо описывается формулой (27) и возрастает с увеличением радиуса кольца. Видно, что амплитуда осцилляций слабо зависит от радиуса кольца. Вблизи максимумов и минимумов незатухающего тока энерге-

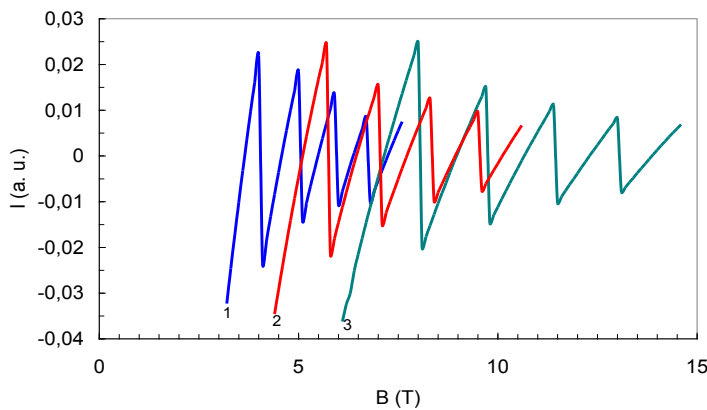


Рисунок 12 – Зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля ($N=7$, $\hbar\omega_0 = 4$ мэВ): кривая 1 — $r_0 = 3$, кривая 2 — $r_0 = 2$, кривая 3 — $r_0 = 1$

В квантовых точках без учета электрон-электронного взаимодействия осцилляции незатухающего тока невозможны. Для вычисления величины незатухающего тока в двумерных квантовых точках используем выражение (28). Считаем, что внешний потенциал $V_{ext}(r)$ создается положительно заряженным фоном плотности n_p , не равным нулю при $r < R$.

Как показано ранее в одночастичном приближении наличие магических чисел с периодом $\Delta M = N$ объясняется компактной конфигурацией электронов в пространстве углового момента. В дальнейшем предполагаем, что все электроны имеют компактную конфигурацию. Результаты численных решений уравнений Кона-Шэма для GaAs квантовой точки с $N = 40$ и $N = 9$ приведены на рисунке 13. Первые линейные отрезки на рисунке 13 соответствуют полному угловому моменту $M = N(N-1)/2 + N$. Видно, что амплитуда осцилляций слабо зависит от числа электронов, а период осцилляций уменьшается с увеличением N . Для кривых, представленных на рисунке 13, период осцилляций незатухающего тока неплохо описывается формулой (27).

С изменением величины углового момента электронов следует ожидать изменение незатухающего тока в квантовом кольце. Незатухающий ток представляет собой сумму парамагнитного и диамагнитного токов:

$$I = -\sum_m \int \frac{2m}{r} \psi_m^2(r) dr + \frac{N}{2\pi L^2} . \quad (28)$$

Результаты вычислений приведены на рисунке 12. Первые линейные отрезки на кривых рисунка 12 соответствуют значению $M = 28$, далее с увеличением магнитного поля величина полного углового

момента возрастает с периодом $N = 7$. Период осцилляций незатухающего тока хорошо описывается формулой (27). В этих вычислениях предполагалось, что электроны имеют компактную конфигурацию. тическая щель близка к нулю, поэтому учет примесного потенциала и (или) температуры приведет к сглаживанию осцилляций в этих точках. Вычисления, проведенные для различных значений N и ω_0 ($N < 14$, величина $\hbar\omega_0$ бралась 4, 6, 8 мэВ) также показали, что период осцилляций незатухающего тока хорошо описывается формулой (27).

Считая, что выражение (26) верно при $M=M_0$, получим для периода осцилляций незатухающего тока:

$$\Delta B = \frac{2B_0}{N-1}, \quad (29)$$

где B_0 середина плато при $M=M_0$.

Для макроскопической системы при $M=M_0$ фактор заполнения $\nu=1$, поэтому из выражения (29) для изменения магнитного потока через квантовую точку $\Delta\Phi = \Delta B\pi R^2$ получаем:

$$\Delta\Phi = \frac{2N}{N-1}\Phi_0, \quad (30)$$

где $\Phi_0=h/e$.

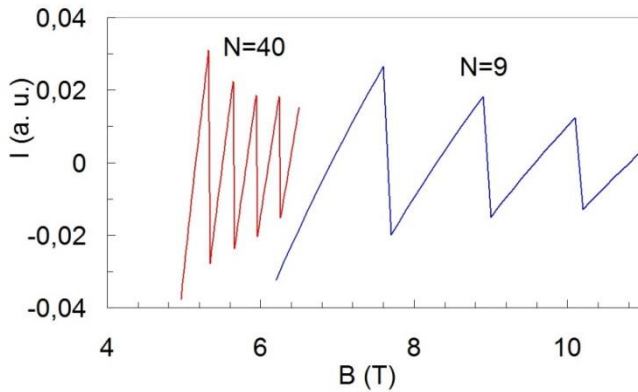


Рисунок 13 – Зависимость незатухающего тока в квантовых точках с $N=9$ и 40 от магнитного поля ($n_p=10^{11}$ см $^{-2}$)

С увеличением числа электронов в квантовой точке период осцилляций незатухающего тока в зависимости от магнитного потока уменьшается и для квантовой точки с большим числом электронов период будет близок к двум квантам магнитного потока.

Выражения для периода осцилляций незатухающего тока (27), (29) и (30) получены для периода магических чисел $\Delta M = N$. Как показано ранее, возможны и другие периоды магических чисел $\Delta M = N - k$. Для такого периода магических чисел период осцилляций незатухающего тока будет отличаться от выражений (27), (29) и (30).

4-я глава «Электронная структура вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле» посвящена исследованию влияния магнитного поля на электронные свойства двух двумерных вертикально-связанных квантовых точек.

Последние достижения в технологии изготовления полупроводниковых структур позволяют создавать вертикально-связанные квантовые точки. В настоящей главе исследуется электронная структура двойных вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле. Такие квантовые точки можно рассматривать как искусственную молекулу. В отличие от одиночной квантовой точки здесь появляется два новых параметра: d – расстояние между квантовыми точками и Δ_{sas} – туннельная щель. Для двойных квантовых точек одноэлектронные состояния разделяются на симметричные и антисимметричные за счет межслойного туннелирования.

В случае двух одинаковых квантовых точек достаточно решить уравнение Шредингера для электронов, находящихся в одной квантовой точке. Для магнитных полей, при которых занят только нижний спиновый уровень Ландау, уравнения Кона-Шэма имеют вид:

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{4L^4} + \frac{m^2}{r^2} - \frac{m}{L^2} + V_{eff}(r) \right\} \psi_m(r) = E_m \psi_m(r), \quad (31)$$

с эффективным одночастичным потенциалом:

$$V_{eff}(r) = V_c(r,0) + V_c(r,d) - V_{c,m}(r,0) - V_{c,m}(r,d) + 2\alpha(n(r) - n_m(r)) + V(r), \quad (32)$$

$$V(r) = \frac{\omega_0^2}{4} r^2, \quad V_c(r,d) = 2 \int \frac{n(r') dr'}{\sqrt{|r-r'|^2 + d^2}}, \quad V_{c,m}(r,d) = 2 \int \frac{n_m(r') dr'}{\sqrt{|r-r'|^2 + d^2}}, \quad (33)$$

где m – угловой момент электрона, $n_m(r) = |\psi_m(r)|^2 / 2$, $n(r) = \sum_{\text{occ } m} n_m(r)$.

Уравнения Кона-Шэма (31)-(33) решались численно. Сравнение с точными результатами [10] показало, что для энергии отличие составляет около 5 процентов. Проведенные вычисления показали, что возникают новые серии магических чисел для полного углового момента электронов в вертикально-связанных квантовых точках в магнитном поле. Причина возникновения новых серий связана с возможностью заселения антисимметричных состояний, значение которых зависит от величины туннельной щели и напряженности магнитного поля.

Экспериментальные работы [11, 12] по квантовому холловскому состоянию (КХС) при факторе заполнения $\nu = 1$ в двуслойных двумерных электронных системах в GaAs показали ряд поразительных явлений. Если расстояние d между слоями большое, то слои ведут себя независимо с фактором заполнения $\nu = 1/2$ для каждого слоя и квантовый эффект Холла не наблюдается. С уменьшением d и плотности электронов происходит фазовый переход и возникает холловское плато с фактором заполнения $\nu = 1$ (рисунок 14). Необычность этого явления заключается в том, что холловское плато с $\nu = 1$ сохраняется при нулевой туннельной щели. На вставке рисунка 14 показана фазовая диаграмма перехода в КХС с $\nu = 1$.

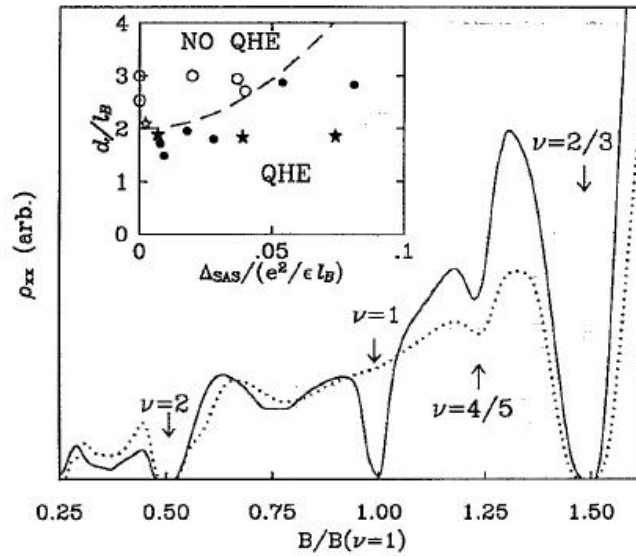


Рисунок 14 – Зависимость диагонального сопротивления от магнитного поля для двух образцов. В одном образце ($d = 3$ нм, $N_e = 1,26 \cdot 10^{11}$ см⁻²) квантовый эффект Холла при $\nu = 1$ наблюдается, в другом ($d = 4$ нм, $N_e = 1,45 \cdot 10^{11}$ см⁻²) – отсутствует. Вставка: фазовая диаграмма при $\nu = 1$. Закрашенные символы соответствуют образцам, в которых наблюдается квантовый эффект Холла при $\nu = 1$, не закрашенные символы – нет квантового эффекта Холла. Рисунок взят из работы [11]

Видно, что при $d/l_B < 2$ (l_B – магнитная длина) квантовый эффект Холла с $\nu = 1$ наблюдается при любых значениях туннельной щели. Дальнейшие экспериментальные исследования [12] показали, что критическое отношение d/l_B , ниже которого КХС при $\Delta_{sas} = 0$ существует, несколько меньше.

В рамках теории функционала плотности найдем условия стабильности квантового холловского состояния (КХС) при $\nu = 1$ в системе двух вертикально-связанных квантовых точек с большим числом электронов N . Одинаковые квантовые точки разделены барьером

и находятся на расстоянии d друг от друга. Уровни энергии симметричных и антисимметричных состояний разделены туннельной щелью Δ , изоспин определяется как $I = (N_s - N_a)/2$ (N_s (N_a) – число электронов в подзоне симметричных (антисимметричных) состояниях).

Электроны удерживаются внутри квантовых точек параболическими потенциалами $V = \omega_0^2 r_{1,2}^2 / 4$ (r_1 и r_2 – двумерные радиус векторы вдоль плоскости квантовых точек). Такой потенциал может создаваться диском радиуса R с плотностью заряда n_p , такой, что в целом система является нейтральной $n_p \pi R^2 = N$. В этом случае удерживающий потенциал при малых r имеет квадратичную зависимость от r , при этом $\omega_0 = 2(\pi n_p)^{3/4} / N^{1/4}$.

В случае одинаковых квантовых точек уравнение Шредингера из системы уравнений Кона-Шэма (31)-(33) решается для электронов находящихся в одной квантовой точке. Все расчеты проводились для GaAs квантовых точек.

В КХС при $\nu = 1$ все электроны занимают только уровень энергии симметричного состояния и имеют максимальный изоспин $I = N/2$ и минимальный полный угловой момент $M = N(N-1)/2$, при этом все электроны в пространстве углового момента имеют конфигурацию $(0, 1, \dots, N-1)$. Изучался переход из этого состояния в состояние с большим угловым моментом при больших величинах Δ (переход из КХС для сильно связанных квантовых точек). Кривые $B_1(\omega_0)$ на рисунке 15 показывают структурный переход $(0, 1, \dots, N-1) \rightarrow (1, 2, \dots, N)$, который близок к переходу из состояния с $\nu = 1$ в состояние с $\nu < 1$.

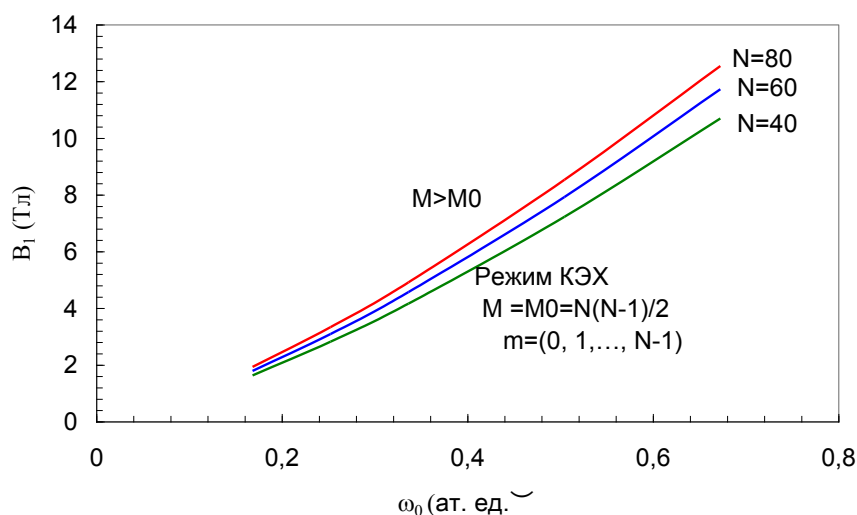


Рисунок 15 – Переход из состояния с конфигурацией электронов $(0, 1, \dots, N-1)$ в состояние с конфигурацией $(1, 2, \dots, N)$ ($d=1$)

Далее вблизи кривой $B_1(\omega_0)$ (при $B < B_1$) находилась минимальная величина туннельной щели, при которой КХС с $\nu = 1$ является стабильным. Изучался переход из КХС в состояние с $N_a = 1$ и произвольным угловым моментом электронов, при котором вся система имеет минимальную энергию. Причем предполагается, что все электроны в подзоне симметричного состояния имеют компактную конфигурацию в пространстве углового момента. Фазовая диаграмма перехода в КХС приведена на рисунке 16. Видно, что при небольших магнитных полях (низких плотностях электронов) КХС является энергетически выгодным при любых значениях Δ . Отметим, что переход из КХС всегда происходит в состояние с $N_a = 1$, а при дальнейшем увеличении B значение N_a увеличивается. Подобное поведение системы в макроскопическом пределе приведет к возникновению холловского плато при низких плотностях электронов в структуре с нулевой туннельной щелью [11, 12].

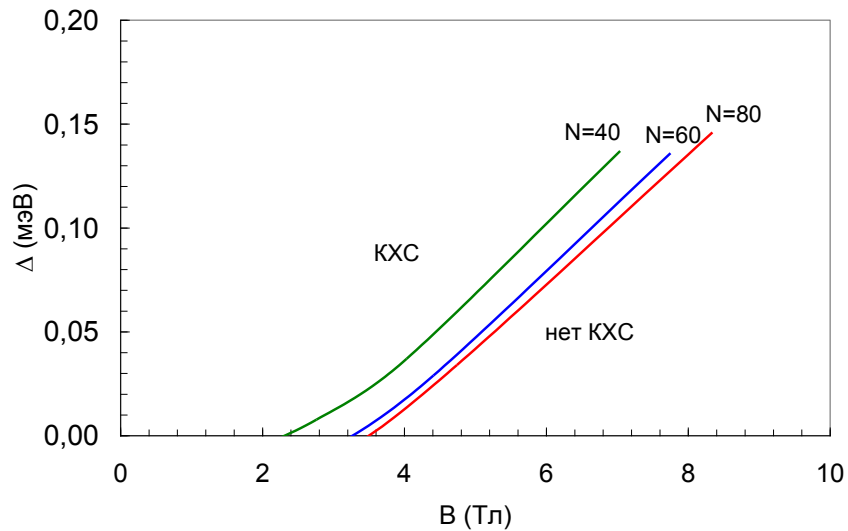


Рисунок 16 – Зависимость величины минимальной туннельной щели от магнитного поля ($d=1$)

Были проведены вычисления при $\Delta = 0$ для различных значений d в интервале значений от 0,5 до 1. Результаты этих вычислений представлены на рисунке 17. Видно, что при изменении d величина магнитного поля, при котором КХС является стабильным, сильно изменяется. При этом отношение d/L изменяется слабо (около 15 процентов). Из

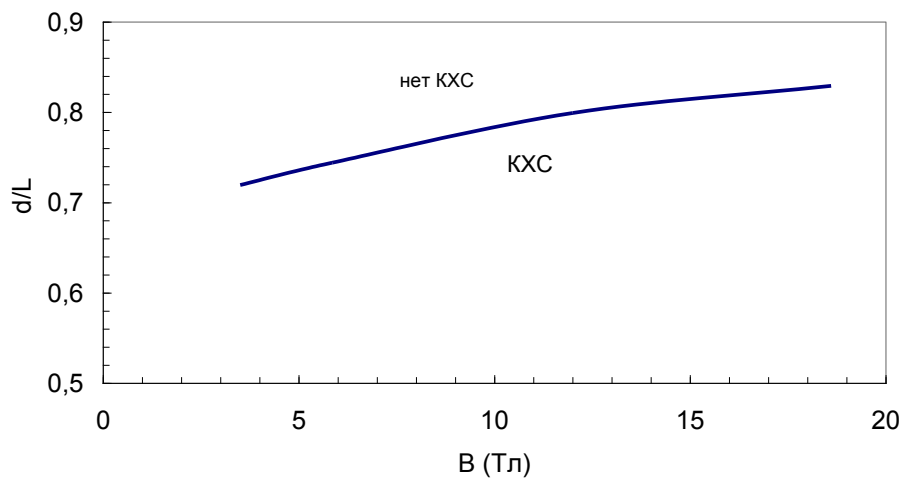


Рисунок 17 – Зависимость отношения d/L , при котором происходит переход в КХС, от магнитного поля ($N=80$, $\Delta=0$).

результатов, представленных на рисунках 16 и 17, видно, что КХС всегда является стабильным при $d/L < 0,7$ (эксперименты дают значение $d/L < 2$ [11] и $d/L < 1,7$ [12]). Такое различие, по-видимому, связано с влиянием примесного потенциала и неоднородностей на электронные свойства двойных слоев. Действительно хорошо известно, что в режиме целочисленного квантового эффекта Холла в одиночных слоях примеси и неоднородности сильно влияют на величину холловского плато.

Изучено влияние примесного потенциала на свойства перехода в КХС. В качестве примесного потенциала взята примесь с зарядом z_0 : $V(r) = -2z_0 / \sqrt{r^2 + d^2/4}$ (используется атомная система единиц). Для вычисления критической величины туннельной щели, выше

которой КХС является стабильным, численно решались уравнения Кона-Шэма. Из результатов, представленных на рисунке 18, видно, что КХС всегда является стабильным при $d/L < 3$. Отметим, что при уменьшении z_0 критическое значение d/L уменьшается. Таким образом, впервые показано, что примесный потенциал значительно влияет на условие стабильности КХС при $\nu = 1$.

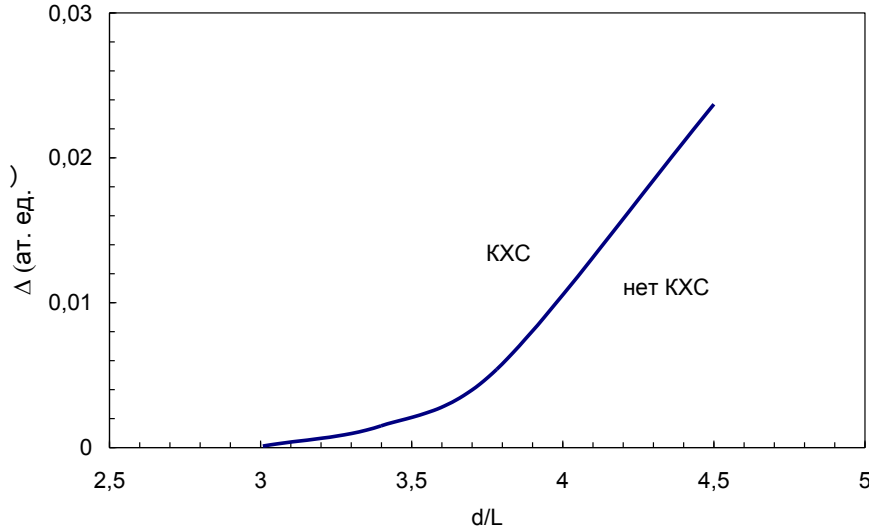


Рисунок 18 – Фазовая диаграмма перехода из КХС при $\nu = 1$ ($z_0 = 1$, $d = 2,8$, $N = 80$)

Двумерные электронно-дырочные системы в полупроводниках давно вызывают повышенный интерес. В этих системах возможно возникновение таких физических явлений, как бозе-конденсация, вигнеровская кристаллизация, сверхпроводимость, кулоновское увлечение. Известно, что в квантовых ямах могут образовываться электронно-дырочные комплексы, состоящие из нескольких частиц. Простейшими из них являются экситоны, положительно или отрицательно заряженные трионы и биэкситоны. Могут также образовываться комплексы с большим числом частиц. Прогресс в этой области требует более четкого учета электронно-дырочных корреляций. С помощью теории функционала плотности вычислим полную энергию пространственно разделенных электронно-дырочных квантовых слоев с конечным числом электронно-дырочных пар N в магнитном поле B .

Для двухкомпонентной системы (электроны и дырки) полная энергия запишется как

$$E_t[n_e, n_h] = T_e[n_e] + T_h[n_h] + E_c[n_e, n_h] + E_{xc}[n_e, n_h], \quad (34)$$

где T_e , T_h – кинетическая энергия носителей, E_c – электростатическая энергия, E_{xc} – обменно-корреляционная энергия, n_e и n_h – плотности электронов и дырок.

Уравнения Кона-Шэма для электронов и дырок в экситонной системе единиц имеют вид:

$$\left[-\frac{\mu}{m_e} \frac{1}{r_e} \frac{\partial}{\partial r_e} \left(r_e \frac{\partial}{\partial r_e} \right) + \frac{\mu}{m_e} \frac{k_e^2}{r_e^2} - \frac{\mu}{m_e} \frac{k_e}{L^2} + \frac{\mu}{m_e} \frac{r_e^2}{4L^4} + V_{eff,e,k_e}(r_e) \right] \psi_{e,k_e}(r_e) = E_{e,k_e} \psi_{e,k_e}(r_e), \quad (35)$$

$$\left[-\frac{\mu}{m_h} \frac{1}{r_h} \frac{\partial}{\partial r_h} \left(r_h \frac{\partial}{\partial r_h} \right) + \frac{\mu}{m_h} \frac{k_h^2}{r_h^2} - \frac{\mu}{m_h} \frac{k_h}{L^2} + \frac{\mu}{m_h} \frac{r_h^2}{4L^4} + V_{eff,h,k_h}(r_h) \right] \psi_{h,k_h}(r_h) = E_{h,k_h} \psi_{h,k_h}(r_h), \quad (36)$$

где k_e (k_h) – угловой момент электрона (дырки), m_e (m_h) – масса электрона (дырки), L – магнитная длина, $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$, $V_{eff,e,k_e}(r) = -V_h(r, d) + V_e(r, 0) - V_{e,k_e}(r, 0) + V_{xc,e}(r)$,

$$V_{eff,h,k_h}(r) = -V_e(r, d) + V_h(r, 0) - V_{h,k_h}(r, 0) + V_{xc,h}(r), \quad V_e(r, d) = 2 \int \frac{n_e(r') dr'}{\sqrt{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + d^2}},$$

$$V_{e,k_e}(r,d) = 2 \int \frac{\psi_{e,k_e}^2(r') dr'}{\sqrt{|r-r'|^2 + d^2}}, \quad V_h(r,d) = 2 \int \frac{n_h(r') dr'}{\sqrt{|r-r'|^2 + d^2}}, \quad V_{h,k_h}(r,d) = 2 \int \frac{\psi_{h,k_h}^2(r') dr'}{\sqrt{|r-r'|^2 + d^2}},$$

$$n_{e,k_e}(r) = \psi_{e,k_e}^2(r), \quad n_e(r) = \sum_{k_e} n_{e,k_e}(r), \quad n_{h,k_h}(r) = \psi_{h,k_h}^2(r), \quad n_h(r) = \sum_{k_h} n_{h,k_h}(r), \quad d - \text{расстояние}$$

между электронной и дырочной квантовыми ямами.

Мы рассматриваем квантовые ямы, как слои нулевой толщины. Отметим, что при небольшом количестве частиц в выражении (34) необходимо исключать самодействие частиц. Исключение самодействия частиц приводит к хорошему согласию с точными результатами для квантовых точек с небольшим числом электронов. Кроме этого для пространственно разделенных электронно-дырочные слоев при слабом перекрытии волновых функций в поперечном направлении можно пренебречь межслоевым обменно-корреляционным взаимодействием. Считаем, что все электроны и дырки являются спин-поляризованными, тогда

$$E_{xc} = \int \varepsilon_{x,e}(n_e) n_e(r) dr - \sum_{k_e} \int \varepsilon_{x,e}(n_{e,k_e}) n_{e,k_e} dr + \int \varepsilon_{x,h}(n_h) n_h(r) dr - \sum_{k_h} \int \varepsilon_{x,h}(n_{h,k_h}) n_{h,k_h} dr, \quad (37)$$

где $\varepsilon_{x,e} = \alpha n_e$, $\varepsilon_{x,h} = \alpha n_h$, $\alpha = \pi \sqrt{2\pi L}$.

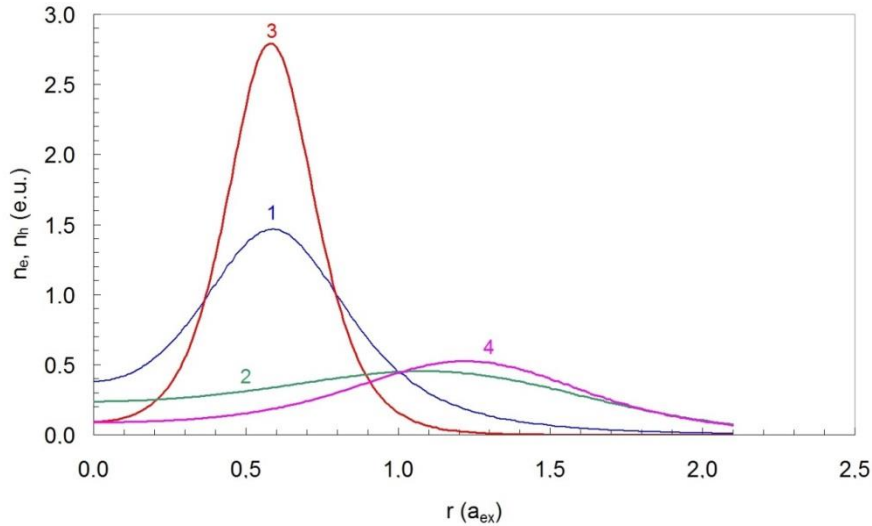


Рисунок 19 – Профили плотности электронов (1 – $d=0$; 2 – $d=3,6$) и дырок (3 – $d=0$; 4 – $d=3,6$). ($B=8$ Тл, $N=4$, $m_e=0,067$, $m_h=2m_e$)

Уравнения Кона-Шэма решались численно для различных величин N и d . В вычислениях использовались следующие параметры: $\varepsilon=12,6$, $m_e=0,077m_0$ (m_0 – масса свободного электрона). На рисунке 19 приведены плотности электронов и дырок в случае неравных масс m_e и m_h . Видно, что с увеличением d плотность носителей уменьшается и имеет более протяженное состояние. Это связано с уменьшением кулоновского взаимодействия между электронами и дырками. Отметим, что профили плотностей имеют форму колец, несмотря на то, что состояния с нулевыми угловыми моментами заняты.

На рисунках 20 и 21 представлены результаты вычислений энергии на одну электронно-дырочную пару $E_{eh}=E_V/N$ для N от 1 до 5. При $N > 5$ значение E_{eh} слабо зависит от N при $d < 0,5$, однако E_{eh} при $d=0$ с увеличением N уменьшается (вычисления проводились до $N=10$). Таким образом, прямые комплексы могут содержать большое число электронно-дырочных пар. С увеличением d происходит уменьшение N в

электронно-дырочном комплексе и при больших d энергетически выгодным будет состояние с двумерным экситоном.

Состояние с двумерным экситоном будет основным при $d > 0,8$ для $m_h = m_e$ (рисунок 20) и $d > 1,2$ для $m_h = 2m_e$ (рисунок 21). Следует ожидать, что с уменьшением отношения m_e/m_h область стабильности электронно-дырочного комплекса с $N > 1$ увеличивается.

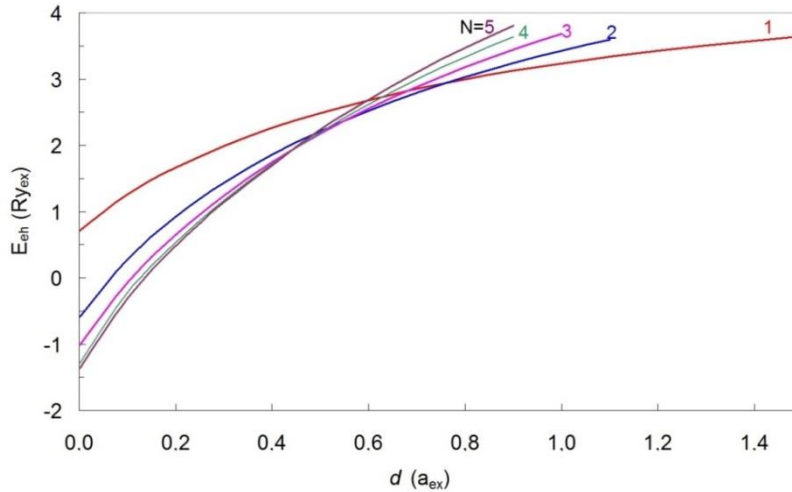


Рисунок 20 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от расстояния между квантовыми слоями ($B = 8$ Тл, $m_e = 0,067$, $m_h = m_e$)

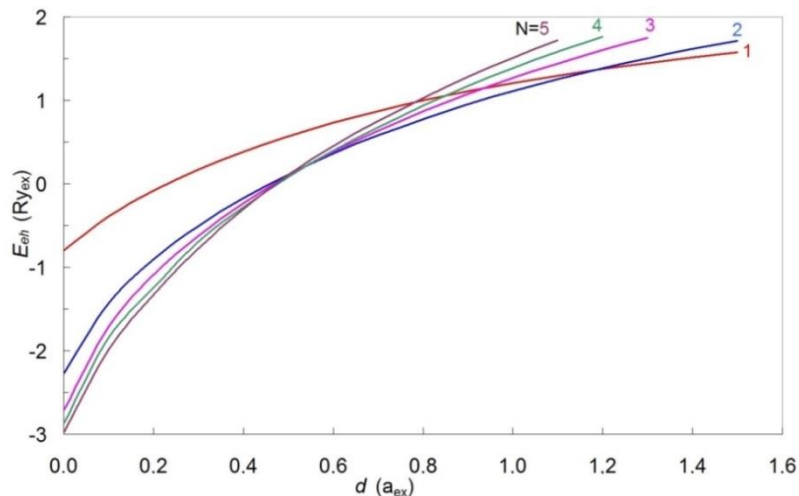


Рисунок 21 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от расстояния между квантовыми слоями ($B = 8$ Тл, $m_e = 0,067$, $m_h = 2m_e$).

Уравнения Кона-Шэма (35)-(36) решались численно для различных значений магнитного поля и расстояния между квантовыми точками. Вычисления проводились для различных наборов k_e и k_h и найдено, что минимум энергии достигается при компактной конфигурации частиц (заселены соседние состояния). Этот результат продемонстрирован на рисунке 22 для $N=5$. Видно, что полная энергия имеет минимумы при суммарном угловом моменте дырок $K_h = 10$ ($k_h = 0, 1, 2, 3, 4$), $K_h = 15$ ($k_h = 1, 2, 3, 4, 5$) and $K_h = 20$ ($k_h = 2, 3, 4, 5, 6$), т.е. период магических чисел равен 5. С увеличением N (вычисления проводились до десяти электронно-дырочных пар) также получен период магических чисел для полного углового момента электронов и дырок, равный N . Такой же период магических чисел был получен в точных расчетах [13] при $N = 3$, когда расстояние между

электронными и дырочными точками относительно велико. Известно, что магические числа с периодом N встречаются в одиночных квантовых точках. Результаты, представленные на рисунке 22, соответствуют магнитному полю, вблизи которого происходит переход от одной конфигурации частиц к другой. Этот переход важен для изучения осцилляций незатухающего тока и дробного квантового эффекта Холла. При магнитном поле $B = 2,22$ Тл минимум полной энергии достигается при $K_e = 15$ и $K_h = 15$. С увеличением магнитного поля основным состоянием становится состояние с $K_e = 20$ и $K_h = 20$.

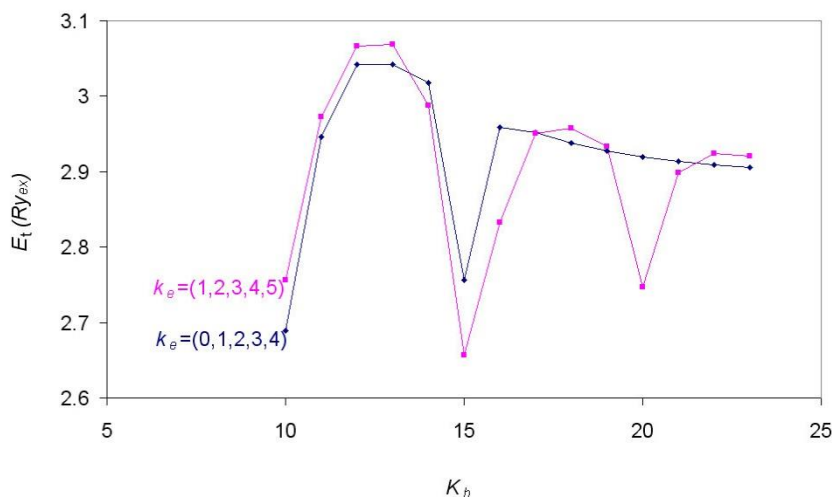


Рисунок 22 – Зависимость полной энергии от суммарного углового момента дырок ($N = 5$, $d = 2$, $B = 2.4$ Т, $m_e = m_h = 0,077m_0$). Точки соединены линиями для наглядности

Изменение угловых моментов электронов и дырок приводит к скачку незатухающего тока. Незатухающие токи для электронов и дырок представляет собой сумму парамагнитного и диамагнитного токов:

$$I_e = -\frac{\mu}{m_e} \sum_{k_e} \int \frac{2k_e}{r} \psi_{e,k_e}^2(r) dr + \frac{\mu}{m_e} \frac{N}{2\pi L^2}, \quad (38)$$

$$I_h = \frac{\mu}{m_h} \sum_{k_h} \int \frac{2k_h}{r} \psi_{h,k_h}^2(r) dr - \frac{\mu}{m_h} \frac{N}{2\pi L^2}, \quad (39)$$

где N – число электронно-дырочных пар.

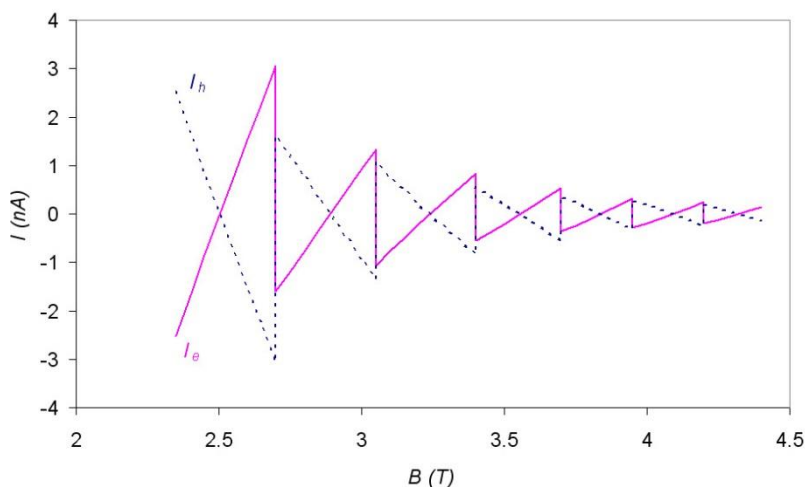


Рисунок 23 – Зависимость незатухающего тока от магнитного поля ($N = 5$, $d = 2$, $m_e = m_h = 0,077m_0$)

На рисунке 23 показана зависимость незатухающего тока электронов и дырок от магнитного поля. Незатухающий ток имеет осцилляционный вид с почти линейными сегментами. Различные сегменты возникают из-за возрастания K_e и K_h при увеличении магнитного поля. Первый сегмент на рисунке 23 соответствует значениям $K_e = K_h = 20$, а последующие сегменты значениям K_e и K_h , равным 20, 25, 30, 35, 40 и 45. Период осцилляций слабо уменьшается с увеличением магнитного поля. Уменьшение амплитуды осцилляций связано с тем, что при больших K_e и K_h диамагнитный ток компенсирует парамагнитный.

На рисунке 24 показана фазовая диаграмма перехода из состояния с $K_e = K_h = 10$ в состояние с $K_e = K_h = 15$. Видно, что переход в новое состояние при малых d возможен только в очень сильных магнитных полях, причем это значение магнитного поля увеличивается с возрастанием массы дырки. При увеличении массы дырок в два раза переход в новое состояние также происходит при $K_e = K_h$, поэтому периоды осцилляций незатухающего тока электронов и дырок будут равны (рисунок 25). Отметим, что амплитуда осцилляций незатухающего тока у дырок меньше, чем у электронов, а период осцилляций становится больше по сравнению со случаем $m_e = m_h$.

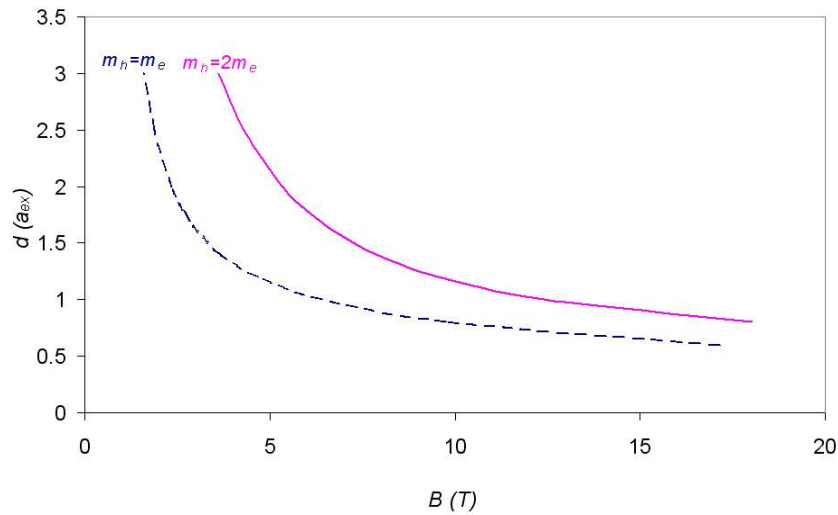


Рисунок 24 – Фазовая диаграмма перехода из состояния $k_e=(0,1,2,3,4)$ и $k_h(0,1,2,3,4)$ в состояние $k_e=(1,2,3,4,5)$ и $k_h=(1,2,3,4,5)$ ($N=3$, $m_e=0,077$)

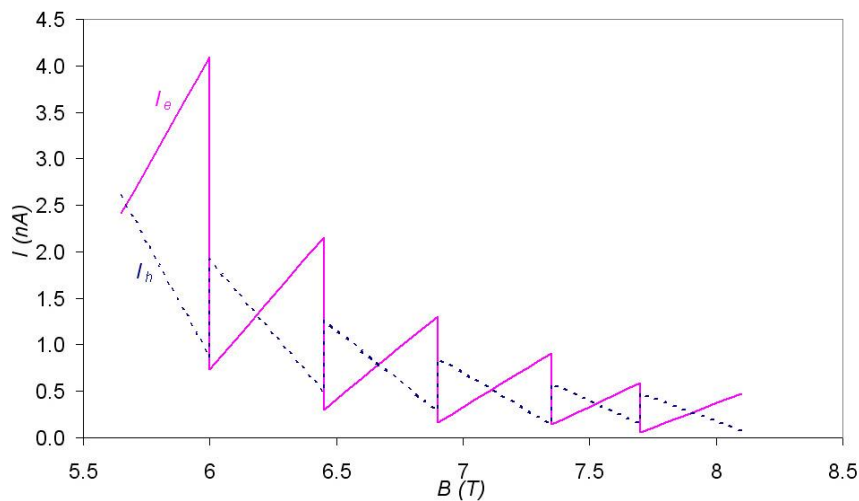


Рисунок 25 – Зависимость незатухающего тока от магнитного поля ($N=3$, $d=2$, $m_h=2m_e$, $m_e=0,077$)

В 5-ой главе «Спиновая поляризация и электронно-дырочная жидкость в квантовых проволоках» используется теория функционала плотности для изучения перехода в спин-поляризованное состояние электронов в квантовой проволоке в нулевом магнитном поле и свойств ЭДЖ в квантовой проволоке.

Численными и аналитическими методами исследуется переход электронов в спин-поляризованное состояние в квантовой проволоке. Рассмотрим одиночный квазиодномерный канал. В направлении оси z электронная плотность имеет вид дельта-функции Дирака, вдоль оси x движение носителей квантуется, а вдоль оси y электроны движутся свободно. Внутри квантовой проволоке электроны удерживаются положительно-заряженным фоном с двумерной плотностью n_p (n_p отлична от нуля при $|x| \leq a/2$, где a – ширина квантовой проволоки).

Согласно теории функционала плотности полная энергия многоэлектронной системы есть однозначный функционал плотности электронов $n(x)$:

$$E_i[n] = T[n] + \frac{1}{2} \int V_H(x)(n(x) - n_p)dx + E_{xc}[n], \quad (40)$$

где $T[n]$ - кинетическая энергия невзаимодействующих электронов, $E_{xc}[n]$ - обменно-корреляционная энергия. Второй член в выражении (40) есть кулоновская энергия электронов.

Далее используем атомную систему единиц. Как правило, корреляционной энергией можно пренебречь и в вычислениях учитывается только обменная энергия

$$\varepsilon_x(n) = -16n^{1/2} / 3\pi^{1/2} g_s^{1/2}, \quad (41)$$

где g_s – спиновый фактор.

Из выражения (40) получаем уравнение Шредингера

$$-\frac{d^2\psi_i}{dx^2} + V_{eff}(x)\psi_i = E_i\psi_i(x), \quad (42)$$

где $V_{eff}(x) = V_H(x) + V_x(x)$,

$$V_H(x) = 4 \int_{-\infty}^{\infty} (n_p - n(x_1)) \ln|x - x_1| dx_1, \quad (44)$$

$$V_x(x) = \frac{d(\varepsilon_x(n) n)}{dn}. \quad (45)$$

В дальнейшем считаем, что только нижний уровень энергии заселен, тогда электронная плотность задается выражением:

$$n(x) = N\psi_0^2(x), \quad (46)$$

где $N = n_p a$ – плотность электронов на единицу длины.

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решалась численно методом итераций. На рисунке 26 показаны потенциалы и волновая функция электронов. Видно, что кулоновский потенциал дает значительно меньший вклад в эффективный потенциал, чем обменный.

Переход в спин-поляризованное состояние происходит при низких плотностях электронов, когда заселен только нижний уровень энергии E_0 (не слишком большие a). В этом случае кинетическая энергия имеет вид

$$T = \frac{\pi^2}{3g_s^2} N^3 + N(E_0 - \int V_{eff}(x)\psi_0^2(x)dx) \quad (47)$$

Из выражений (41) и (47) видно, что при высоких плотностях N всегда энергетически выгодным будет состояние с неполяризованными электронами ($g_s=2$).

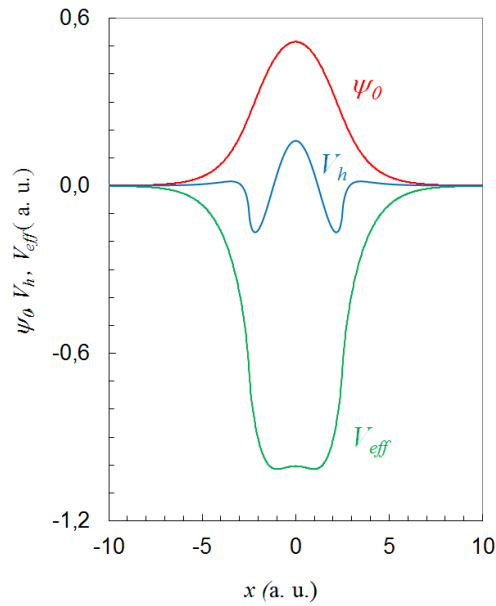


Рисунок 26 – Профили волновой функции и потенциалов электронов ($a=5$, $n_p=0,05$, $g_s=1$)

Система уравнений Кона-Шэма (42)-(45) решалась численно и вычислялась полная энергия электронов для $g_s = 1$ и $g_s = 2$. Результаты вычислений показали, что при плотностях $n_p < n_c$ (или $N < N_c$) энергетически выгодным является состояние с полностью поляризованными электронами (рисунок 27). Отметим, что для узких квантовых проволок критическая плотность n_c может быть высокой, однако величина N_c изменяется слабо. Из результатов, представленных на рисунке 27, можно также оценить величину критической плотности для двумерного случая. При $d=7$ величина $n_c \approx 0,04$ (примерно $4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ для GaAs), которая соответствует верхней границе перехода в спин-поляризованное состояние двумерного электронного газа.

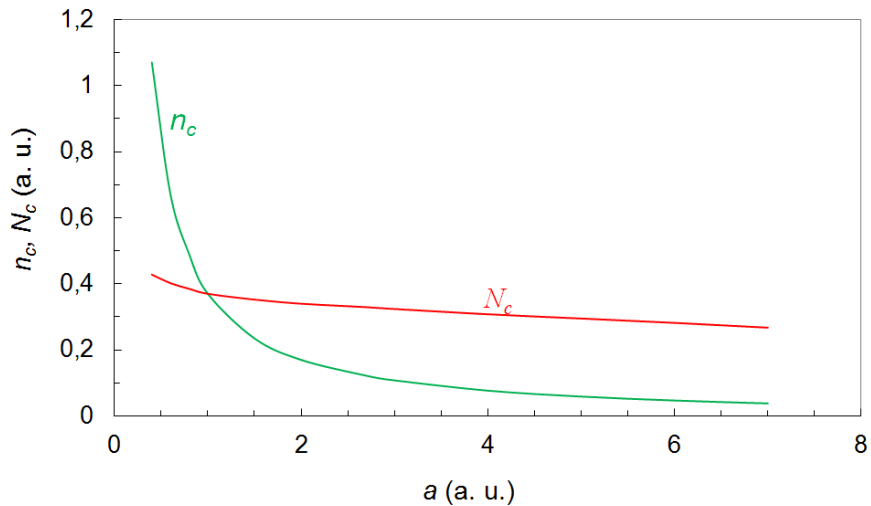


Рисунок 27 – Фазовая диаграмма перехода в спин-поляризованное состояние в квантовой проволоке

Результаты расчетов показали, что вклад кулоновского взаимодействия в полную энергию значительно меньше, чем вклад кинетической и обменной энергии. Пренебрегая кулоновским вкладом, оценим полную энергию системы. Возьмём пробную волновую функцию электронов в виде

$$\psi_0(x) = \frac{\exp(-x^2/2b^2)}{\pi^{1/4}(b)^{1/2}} . \quad (48)$$

Тогда полная энергия имеет следующий вид:

$$E_t = \frac{\pi^2 N^3}{3g_s^2} + \frac{N}{2b^2} - \left(\frac{2}{3}\right)^{3/2} \frac{8N^{3/2}}{\sqrt{bg_s}\pi^{3/4}} . \quad (49)$$

Первые два слагаемых соответствуют кинетической энергии, третье слагаемое – обменной энергии. Из выражения (49) находим b , при котором достигается минимум энергии:

$$b = \frac{3\pi^{1/2}}{4} \left(\frac{g_s}{2N}\right)^{1/3} . \quad (50)$$

Подставляя значение b в выражение (49) получаем

$$E_t = \frac{3,29N^3}{g_s^2} - \frac{1,35N^{5/3}}{g_s^{2/3}} . \quad (51)$$

Из уравнения $E_t(g_s=1) = E_t(g_s=2)$ получаем для значения критической плотности $N_c=0,3$. Полученное значение N_c хорошо согласуется с точными значениями, представленными на рисунке 27.

Можно также оценить значение критической плотности, представляя обменный потенциал как

$$V_x(x) = -\frac{8N^{1/2} \exp(-x^2/2b^2)}{\pi^{3/4}(bg_s)^{1/2}} \approx -\frac{8N^{1/2}}{\pi^{3/4}(bg_s)^{1/2}} \left(1 - \frac{x^2}{2b^2}\right) . \quad (52)$$

Для такого потенциала получаем из уравнения Шредингера (42)

$$b = \frac{\pi^{1/2}}{2} \left(\frac{g_s}{2N}\right)^{1/3} . \quad (53)$$

Этому значению b соответствует полная энергия

$$E_t = \frac{3,29N^3}{g_s^2} - \frac{1,19N^{5/3}}{g_s^{2/3}} . \quad (54)$$

Используя выражение (54) получаем критическую плотность электронов $N_c=0,27$, что также хорошо согласуется с точными вычислениями.

В главе 5 также изучались свойства ЭДЖ в квантовой проволоке. Показано, что с увеличением отношения массы дырки к массе электрона и с увеличением числа долин энергия на одну электронно-дырочную пару уменьшается и основным состоянием становится ЭДЖ. Получено хорошее согласие с экспериментальными результатами для InAs квантовой проволоки.

В заключении кратко сформулированы результаты диссертационного исследования. Настоящая диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию влияния взаимодействия носителей заряда, размерных параметров наноструктур, удерживающих потенциалов, магнитного и электрического поля на свойства носителей заряда в квантовых точках, квантовых ямах и квантовых проволоках. При всем разнообразии рассмотренных в диссертационной работе задач, все они связаны с определяющей ролью межчастичного взаимодействия. Для учета этого взаимодействия использовалась теория функционала плотности. Численно и аналитически решались уравнения Кона-Шэма. Основные результаты работы:

Получено аналитическое выражение для энергии квазидвумерной ЭДЖ в зависимости от масс электрона и дырки, анизотропии масс и числа эквивалентных долин.

Показано, что в гетероструктурах Si/SiGe/Si при низких концентрациях германия (несколько процентов) образуется трехкомпонентная ЭДЖ. С увеличением содержания германия происходит переход к двухкомпонентной ЭДЖ, причем равновесная плотность

электронно-дырочных пар сильно уменьшается. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментом.

Получено аналитическое выражение для энергии трехкомпонентной ЭДЖ в магнитном поле. Показано, что в магнитном поле плотность электронно-дырочных пар увеличивается. Зависимости факторов заполнения уровней Ландау от магнитного поля имеют форму плато, т.е. по крайней мере для одного типа носителей заряда часть уровней Ландау полностью заполнена.

Показано, что в слоях алмаза толщиной в несколько нанометров ЭДЖ является многокомпонентной и состоит из электронов, тяжелых, легких и спин-орбитально расщепленных дырок. В (111) слоях алмаза равновесная плотность электронно-дырочных пар значительно выше, чем в (100) слоях алмаза. Найдено, что в (111) слоях алмаза критическая температура ЭДЖ близка к комнатной температуре.

В квантовой точке в сильном магнитном поле найдены новые серии магических чисел с периодом $\Delta M = N - k$ с $k = 2, 3, 4, 5$. Серии магических чисел связаны с тем, что k электронов имеют компактную конфигурацию и находятся в центре квантовой точки, а остальные электроны также имеют компактную конфигурацию и распределены по кольцу. Вычислена величина незатухающего тока в квантовом кольце в зависимости от магнитного поля. Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока.

В координатах величина туннельной щели – напряженность магнитного поля построена фазовая диаграмма перехода в квантовое холловское состояние (КХС) в двойных квантовых точках при факторе заполнения уровня Ландау, равном единице. Показано, что для нулевой туннельной щели КХС может быть стабильным.

В рамках теории функционала плотности вычислена энергия двумерного электронно-дырочного комплекса в магнитном поле в зависимости от расстояния между квантовыми ямами и от числа электронно-дырочных пар. Найдено, что прямые электронно-дырочные комплексы могут содержать большое число электронно-дырочных пар. Показано, что с увеличением межслоевого расстояния число частиц в комплексе уменьшается.

Самосогласованно решена система уравнений Кона-Шэма для пространственно разделенных двумерных электронов и дырок в сильном магнитном поле. Вычислена полная энергия электронно-дырочной системы и найдена серия магических чисел для полного углового момента электронов и дырок. Показано, что изменения углового момента носителей заряда с изменением магнитного поля приводят к осцилляциям незатухающего тока электронов и дырок. Незатухающий ток имеет осцилляционный вид с почти линейными сегментами.

В координатах ширина квантовой проволоки – критическая плотность построена фазовая диаграмма перехода электронов в спин-поляризованное состояние. Показано, что для квантовых проволок значение одномерной критической плотности, при которой происходит переход в спин-поляризованное состояние, в зависимости от ширины проволоки изменяется слабо. Предложен метод приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера. Аналитически получена оценка величины критической плотности, которая находится в хорошем согласии с точными результатами.

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.С. Багаев, В.С. Кривобок, С.Н. Николаев, Е.Е. Онищенко, М.Л. Скориков, А.В. Новиков, Д.Н. Лобанов, Влияние барьера для электронов на конденсацию экситонов и многочастичных состояний в квантовых ямах SiGe/Si // Письма в ЖЭТФ. – 2011 – Т. 94. – С. 63-67.
2. S.N. Nikolaev, V.S. Bagaev, V.S. Krivobok, E.T. Davletov, A.S. Gulyashko, G.F. Kopytov, A.A. Vasilchenko, Multicomponent Structure of an Electron-Hole Liquid in Shallow SiGe/Si

Quantum Wells // В. Russ. Acad. Sci.: Phys. – 2018. – V. 82. – P. 427-430.

3. С.Н. Николаев, В.С. Кривобок, В.С. Багаев, Е.Е. Онищенко, А.В. Новиков, М.В. Шалеев, Тонкая структура излучения двумерной электронно-дырочной жидкости в SiGe/Si квантовых ямах // – 2016. – Т. 104. – С. 161-166.

4. Т.М. Бурбаев, М.Н. Гордеев, Д.Н. Лобанов, А.В. Новиков, М.М. Рзаев, Н.Н. Сибельдин, М.Л. Скориков, В.А. Цветков, Д. В. Шепель, Электронно-дырочная жидкость и экситонные молекулы в квазидвумерных SiGe-слоях гетероструктур Si/SiGe/Si // Письма в ЖЭТФ. – 2010. – Т. 92. – С. 341-345.

5. N. Paus, V. Calvo, J. Eymery, F. Fournel, N. Magnea, Electronic and optical properties of Si/SiO₂ nanostructures. II. Electron-hole recombination at the Si/SiO₂ quantum-well–quantum-dot transition. // Phys. Rev. – 2005. – V. 72. – P. 205324-1-205324-13.

6. F.E. Leys, N.H. March, G.G.N. Angilella, M.L. Zhang, Similarity and contrasts between thermodynamic properties at the critical point of liquid alkali metals and of electron-hole droplets // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 66. – P. 073314.

7. R. Shimano, M. Nagai, K. Horiuchi, M. Kuwata-Gonokami, Formation of a High T_c Electron-Hole Liquid in Diamond // Phys. Rev. Lett. . – 2002. – V. 88. – P. 057404.

8. P.A. Maksym, Magic number ground states of quantum dots in a magnetic field // Physica B. – 1993. – V. 184. – P. 385-393.

9. C. Yannouleas, U. Landman, Structural properties of electrons in quantum dots in high magnetic fields: Crystalline character of cusp states and excitation spectra // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 235319-235327.

10. H. Imamura, P.A. Maksym, H. Aoki, Vertically coupled double quantum dots in magnetic fields // Phys. Rev. B. – 1999. – V. 59. – P. 5817-5825.

11. S.Q. Murphy, J.P. Eisenstein, G.S. Boebinger, L.N. Pfeiffer, K.W. West, Many-body integer quantum Hall effect: Evidence for new phase transitions // Phys. Rev. Lett. . – 1994. – V. 72. – P. 728.

12. M. Kellogg, I.B. Spielman, J.P. Eisenstein, L.N. Pfeiffer, K.W. West, Observation of Quantized Hall Drag in a Strongly Correlated Bilayer Electron System // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 88. – P. 126804.

13. E. Anisimovas, F.M. Peeters, Correlated few-particle states in artificial bipolar molecule // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – P. 233302.

Основные публикации по теме диссертации

В рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК и международные реферативные базы данных Web of Science и Scopus.

1. А.А. Васильченко, Н.А. Яковенко, Электронная структура квантовой точки в сильном магнитном поле // Инженерная физика. – 2008. – №5. – С. 2-5.

2. А.А. Васильченко, Новые серии магических чисел для полного углового момента электронов в вертикально-связанных квантовых точках // Инженерная физика. – 2009. – №9. – С. 8-11.

3. А.А. Васильченко, Стабильность квантового холловского состояния в двойной квантовой точке // Инженерная физика. – 2011. – №1. – С. 19-22.

4. А.А. Васильченко, Теория функционала плотности двумерного электронно-дырочного комплекса // Инженерная физика. – 2012. – №2. – С. 3-5.

5. А.А. Васильченко, Н.А. Яковенко, Электронная структура квантовой точки в магнитном поле: магические числа, квантовый эффект Холла, переход металл-диэлектрик, вигнеровская кристаллизация // Экологический вестник научных центров ЧЭС. – 2007. – №3. – С. 78-84.

6. А.А. Васильченко, А.В. Бунякин, П.В. Сыромятников, Осцилляции незатухающего тока в квантовых кольцах в сильном магнитном поле // Экологический вестник научных центров ЧЭС. – 2010. – №3. – С. 12-15.

7. A.A. Vasilchenko, D.M. Tolkachev, Persistent current oscillations in electron-hole quantum dots // *Nanosystems: physics, chemistry, mathematics*. – 2013. – V. 4, №2. – P. 236-240.
8. С.Н. Николаев, В.С. Багаев, В.С. Кривобок, Э.Т. Давлетов, А.С. Гуляшко, Г.Ф. Копытов, А.А. Васильченко, Многокомпонентная структура электронно-дырочной жидкости в мелких $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ квантовых ямах // *Известия РАН, Серия физическая* – 2018. – Т. 82. – С. 486-489.
S.N. Nikolaev, V.S. Bagaev, V.S. Krivobok, E. T. Davletov, A. S. Gulyashko, G. F. Kopytov, A. A. Vasilchenko, Multicomponent Structure of an Electron-Hole Liquid in Shallow SiGe/Si Quantum Wells // *V. Russ. Acad. Sci.: Phys.* – 2018. – V. 82. – P. 427-430.
9. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, В.С. Кривобок, Д.А. Ермохин Стабильность квазидвумерной электронно-дырочной жидкости в полупроводниковых структурах II рода // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2016. – Т. 59. – С. 151-155.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, V.S. Krivobok, D.A. Ermokhin, The stability of quasi-two-dimensional electron-hole liquid in type-II semiconductor structures // *Russian Physics Journal* – 2017. – V. 59. – P. 1693-1698.
10. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, В.С. Кривобок, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в мелких SiGe/Si квантовых ямах // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2018. – Т. 61, №2. – С. 3-7.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, V.S. Krivobok, Quasi-two dimensional electron-hole liquid in shallow SiGe/Si quantum wells // *Russian Physics Journal*. – 2018. – V. 61, №2. – P. 205-210.
11. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в Si/SiO₂ квантовых ямах // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2018. – Т. 61, №3. – С. 52-56.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, Quasi-two-dimensional electron-hole liquid in Si/SiO₂ quantum wells // *Russian Physics Journal*. – 2018. – V. 61, №3. – P. 457-462.
12. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в магнитном поле // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2018. – Т. 61, №5. – С. 89-93.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, Quasi-two-dimensional electron-hole liquid in a magnetic field // *Russian Physics Journal*. – 2018. – V. 61, №5. – P. 907-912.
13. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в пленках алмаза // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2018. – Т. 61, №8. – С. 727-728.
A.A. Vasilchenko, G. F. Kopytov, High-temperature electron-hole liquid in diamond films // *Russian Physics Journal*. – 2018. – V. 61. – P. 1358-1361.
14. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в электрическом поле // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2018. – Т. 61, №11. – С. 157-161.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, Quasi-two-dimensional electron-hole liquid in an electric field // *Russian Physics Journal*. – 2019 – V. 61 – P. 2121-2125.
15. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Нелинейное экранирование и переход металл-диэлектрик в двумерном электронном газе // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2019. – Т. 62, №1. – С. 88-91.
A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, Nonlinear screening and the metal-insulator transition in a two-dimensional electron gas // *Russian Physics Journal*. – (2019). – V. 62. – P. 100-104.
16. В. С. Багаев, С.Н. Николаев, В.С. Кривобок, М.А. Чернопицкий, А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Экситонная люминесценция бислоев WSe₂ // *Известия высших учебных заведений. Физика*. – 2019. – Т. 62, №6 – С. 88-93.

17. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Стабильность электронно-дырочной жидкости в квантовой проволоке // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2019. – Т. 62, №6. – С. 157-158.
18. А.А. Васильченко, Многокомпонентная электронно-дырочная жидкость в Si/SiGe квантовых ямах // Письма в ЖЭТФ. – 2018. – Т. 108, С. 185-188.
A.A. Vasilchenko, Multicomponent electron-hole liquid in SiGe/Si quantum wells // JETP Lett. – 2018. – V. 108. – P. 185-188.
19. A.A. Vasilchenko, Spontaneous spin polarization in quantum wires // Physics Letters A. – 2015. – V. 378. – P. 3013-3015.
20. A.A. Vasilchenko, D.M. Tolkachev, Magic numbers and persistent current oscillations in electron-hole quantum dots // Modern Physics Letters B. – 2016. – V. 30. – P. 1650013-1-1650013-6.
21. A.A. Vasilchenko, G.F. Kopytov, Quasi-two-dimensional electron-hole liquid with two type of holes in SiGe/Si quantum wells // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. – 2019. – V. 475. – P. 012027-1-012027-6.
22. A.A. Vasilchenko, Density functional theory of two-dimensional electron-hole complexes // Modern Physics Letters B. – 2019. – V. 33. – P. 1950152-1-1950152-6.
23. A.A. Vasilchenko, High-temperature electron-hole liquid in diamond films // Diam. and Relat. Mat. – 2019. – V. 97. – P. 107454.

В сборниках трудов научных конференций

1. А.А. Васильченко, Н.А. Яковенко, Электронная структура квантовой точки в сильном магнитном поле // Сборник тезисов докладов I Всероссийская конференция Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях, МИФИ. – 2008. – С. 39-40.
2. A.A. Vasilchenko, Nonlinear screening of charge impurity by two-dimensional electrons in magnetic // Advanced Research Workshop. Fundamentals of Electronic Nanosystem, St. Petersburg. – 2008. – P. 58
3. А.А. Васильченко, М.М. Векшин, Е.Б. Хотнянская, Н.А. Яковенко, Исследование плазмонно-резонансных эффектов и электронных свойств квантовых точек // Сборник тезисов «Вклад фундаментальных исследований в развитие современной инновационной экономики Краснодарского края», Конференция грантодержателей регионального конкурса Российского фонда фундаментальных исследований, Краснодар. – 2008. – С. 22-25.
4. A.A. Vasilchenko, Vertically coupled double quantum dots in high magnetic fields // Mathematical Modeling and Computational Physics, Dubna, Russia. – 2009. – P. 185.
5. А.А. Васильченко, Стабильность квантового холловского состояния в двойной квантовой точке // XVIII Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Екатеринбург. – 2010. – С. 82-83.
6. А.А. Васильченко, Изоспиновая поляризация электронов в двумерных вертикально-связанных квантовых точках // XXXIII Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА», Екатеринбург. – 2010. – С. 20.
7. A.A. Vasilchenko, A.V. Bunyakin, Persistent currents in vertically coupled quantum rings in magnetic field // International Conference on Mathematical Modeling and Computational Physics, Cosice, Slovakia. – 2011. – P. 73.
8. А.А. Васильченко, А.В. Буныкин, Осцилляции незатухающего тока в квантовых точках, XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Екатеринбург. – 2012.
9. А.А. Васильченко, Переходы между симметричными и антисимметричными состояниями в двойной вертикально-связанной квантовой точке // II Всероссийская

конференция Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях, МИФИ, Москва. – 2009. – С. 78-79.

10. А.А. Васильченко, А.В. Бунякин, Влияние примесного потенциала на стабильность квантового холловского состояния в двойных квантовых точках // XII международная конференция Опто-, nano-электроника, нанотехнологии и микросистемы, Ульяновск. – 2010. – С. 141-142.

11. A.A. Vasilchenko, Nonlinear screening of charge impurity by two-dimensional electrons in a magnetic field // Proceedings of International Conference on Electronic Properties of Two-dimensional Systems and Modulated Semiconductor Structures, Genowa. – 2007. – P. 364.

12. A.A. Vasilchenko, Phase diagram of the electron transition in the spin-polarized state in one-dimensional quantum dot // International Conference on Mathematical Challenge of Quantum Transport in Nanosystems, NRU ITMO, Saint Petersburg. – 2013. – P. 22.

13. А.А. Васильченко, Электронная структура квантовой проволоки в сильном магнитном поле // XXXIV Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА», Екатеринбург. – 2012. – С. 105.

14. A.A. Vasilchenko, Oscillations of electron density in the quantum dot with large number of electrons in high magnetic field // 14th International Conference on Modulated Semiconductor Structures, Kobe Japan. – 2009. – P. 123.

15. А.А. Васильченко, Н.А. Яковенко, Электронная структура квантовой точки в сильном магнитном поле // Наука Кубани, Краснодар. – 2007. – С. 26-29.

16. A.A. Vasilchenko, D.M. Tolkachev, Persistent current oscillations in electron-hole quantum dots // Low-Dimensional Semiconductor Structures, XXII International Material Research Congress, Mexico. – 2013. – P. 84.

17. А.А. Васильченко, Е.Н. Тумаев, Д.А. Ермохин, Расчеты основного состояния квазидвумерной электронно-дырочной плазмы // Известия КубГУ, Естественные науки. – 2014. – №3. – С. 70-75.

18. A.A. Vasilchenko. Density functional theory of two-dimensional electron-hole complexes // 8th International Conference on Quantum dots, Pisa, Italy. – 2014. – P. 121.

19. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, В.С. Кривобок, С.Н. Николаев, Экспериментальное и теоретическое изучение свойств электронно-дырочной жидкости в квантовых ямах Si/SiGe // XXIII Международная конференция: Оптика и спектроскопия конденсированных сред, Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия. – 2017. – С. 371-375.

20. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость с двумя типами дырок в квантовых ямах Si/SiGe // 8-ая Международная научно-практическая конференция по физике и технологии наногетероструктурной СВЧ-электроники, Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия. – 2017. – С. 12.