

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«КУБАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

*А.Вас*

**Васильченко Александр Анатольевич**

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

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Научный консультант  
доктор физико-математических наук,  
профессор Копытов Геннадий Филиппович

Краснодар - 2019

## Оглавление

Введение	4
1 Литературный обзор	26
1.1 Общий формализм теории функционала плотности	26
1.2 Точные вычисления для квантовых точек	29
1.3 Коллективные явления в низкоразмерных системах	34
2 Стабильность квазидвумерной электронно-дырочной жидкости в полупроводниковых структурах	45
2.1 Электронно-дырочная жидкость в мелких и глубоких квантовых ямах. Аналитические вычисления	45
2.2 Многокомпонентная электронно-дырочная жидкость в Si/SiGe квантовых ямах. Численное решение уравнений Кона-Шэма	58
2.3 Электронно-дырочная жидкость в Si/SiO <sub>2</sub> квантовых ямах	67
2.4 Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в электрическом поле	72
2.5 Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в магнитном поле	76
2.6 Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в пленках алмаза	84
2.7 Основные выводы	93
3 Исследование свойств двумерных электронов в сильном магнитном поле	97
3.1 Электронная структура квантовой точки в магнитном поле	97
3.2 Осцилляции незатухающего тока в квантовых точках и кольцах в магнитном поле	110
3.3 Нелинейное экранирование и переход металл-диэлектрик в двумерном электронном газе	120
3.4 Основные выводы	125
4 Электронная структура вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле	128
4.1 Новые серии магических чисел для полного углового	

момента электронов и осцилляции незатухающего тока в вертикально-связанных квантовых точках в магнитном поле	128
4.2 Стабильность квантового холловского состояния в двойных вертикально-связанных квантовых точках	137
4.3 Теории функционала плотности двумерного электронно-дырочного комплекса	141
4.4 Магические числа и осцилляции незатухающего тока в электронно-дырочных квантовых точках	148
4.5 Основные выводы	152
5 Спиновая поляризация и электронно-дырочная жидкость в квантовых проволоках	154
5.1 Спиновая поляризация электронов в квантовой проволоке	154
5.2 Электронная структура квантовой проволоки при низких плотностях электронов	161
5.3 Стабильность электронно-дырочной жидкости в квантовой проволоке	165
5.4 Основные выводы	168
Заключение	171
Список сокращений	174
Литература	175

## Введение

### 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 токах 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.



## Положения и основные 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 индексируются в Web of Science и Scopus.

### **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/SiO<sub>2</sub> 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/SiO<sub>2</sub> 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  $WSe_2$  // 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. А.А. Vasilchenko, Spontaneous spin polarization in quantum wires // Physics Letters A. – 2015. – V. 378. – P. 3013-3015.

20. А.А. 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. А.А. 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. А.А. Vasilchenko, Density functional theory of two-dimensional electron-hole complexes // Modern Physics Letters B. – 2019. – V. 33. – P. 1950152-1-1950152-6.

23. А.А. 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. А.А. 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. Бунякин, 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-, нано-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, Genova. – 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.

### **Структура и краткое содержание диссертации.**

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации составляет 191 страниц, включая 90 рисунков и 2 таблицы. Список цитированной литературы содержит 166 ссылки.

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 ЭДЖ в квантовых ямах.

Для вычисления энергии и равновесной плотности квазидвумерной ЭДЖ используется теория функционала плотности. Для учета обменно-корреляционной энергии используется стандартное приближение

локальной плотности. Ранее теория функционала плотности успешно применялась для изучения свойств трехмерной ЭДЖ в полупроводниках.

В разделе 2.1 на основе приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера получено аналитическое выражение для энергии квазидвумерной ЭДЖ в зависимости от масс электрона и дырки, анизотропии масс и числа эквивалентных долин. Проведено исследование влияния анизотропии масс электронов и числа долин на энергию электронно-дырочной пары и получено, что в отличие от трехмерной ЭДЖ в квазидвумерном случае анизотропия масс электронов увеличивает энергию связи электрона и дырки.

Для структуры Si/SiGe/Si при малом расщеплении между уровнями энергии легких и тяжелых дырок ЭДЖ содержит как легкие, так и тяжелые дырки. С увеличением расщепления происходит переход к ЭДЖ с тяжелыми дырками, причем равновесная плотность сильно уменьшается. Для равновесной плотности электронно-дырочных пар получено удовлетворительное согласие между модельными и экспериментальными результатами. Предложенная модель легко обобщается для структур, в которых существует барьер для дырок и квантовая яма для электронов. Полученные аналитические результаты могут использоваться для оценки параметров квазидвумерной ЭДЖ в других полупроводниках.

Показано, что в ЭДЖ возможна бистабильность, при которой на свойства ЭДЖ может влиять слабое внешнее воздействие. Изучено влияние внешнего электрического поля на свойства ЭДЖ. Показано, что в случае положительно заряженной ЭДЖ минимум энергии в состоянии с легкими и тяжелыми дырками уменьшается по сравнению с минимумом энергии ЭДЖ с тяжелыми дырками.

В разделе 2.2 подробно исследованы свойства ЭДЖ в квантовых ямах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si. Квантовые ямы Si/SiGe/Si представляют собой структуры второго рода, в которых слой SiGe формирует барьер для электронов и квантовую яму для дырок. В таких квантовых ямах экспериментально

была обнаружена необычная структура в спектре излучения ЭДЖ с малым содержанием германия (несколько процентов). Объяснить форму линии конденсированной фазы удалось в рамках представлений о многокомпонентной ЭДЖ, содержащей как тяжелые, так и легкие дырки. Для вычисления энергии численно решены нелинейные уравнения Кона-Шэма для электронов, тяжелых и легких дырок.

Вычисления проведены для структур с различными ширинами ям (барьеров) и содержанием германия. Показано, 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 трехкомпонентная 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 содержит только тяжелые дырки, во втором – легкие и тяжелые дырки. При увеличении концентрации германия основным состоянием становится первый минимум, при этом 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. Учет в расчетах наличия в ЭДЖ легких и тяжелых дырок приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными.

В разделе 2.3 используется теория функционала плотности для вычисления энергии ЭДЖ и нахождения равновесной плотности электронно-дырочных пар в  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  квантовых ямах. Численно решались нелинейные уравнения Шредингера для электронов и дырок. Вычисления проводились для поверхностей кремния (100) и (111). Наибольшая энергия связи и равновесная плотность электронно-дырочных пар получена для поверхности кремния (111). Показано, что энергия связи

квазидвумерной ЭДЖ значительно превышает энергию связи трехмерной ЭДЖ. Проведены расчеты для квантовых ям различной ширины и найдено, что с увеличением ширины квантовых ям энергия связи и равновесная плотность уменьшаются. Получено удовлетворительное согласие вычисленных значений равновесной плотности с экспериментальными результатами для поверхности кремния (100). Также найдено хорошее согласие результатов численных расчетов с результатами аналитических вычислений, приведенных в разделе 2.1.

В разделе 2.4 используется теория функционала плотности для вычисления энергии квазидвумерной ЭДЖ и нахождения равновесной плотности электронно-дырочных пар в присутствии внешнего электрического поля. Численно решались нелинейные уравнения Шредингера для электронов и дырок. Вычисления проводились для ЭДЖ в квантовых ямах  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  с поверхностями кремния (100) и (111). Вычислены плотности электронов и дырок в зависимости от напряженности электрического поля и ширины квантовых ям. Показано, что в широкой квантовой яме происходит сильное расслоение электронов и дырок. Вычисленная равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается при увеличении напряженности электрического поля. Особенно сильное уменьшение плотности происходит в широких квантовых ямах, в которых электрическое поле может разрушить ЭДЖ. Для (100) Si в широких квантовых ям переход к электронно-дырочной плазме происходит в меньшем электрическом поле, чем для (111) Si.

В разделе 2.5 получено аналитическое выражение для энергии трехкомпонентной ЭДЖ в магнитном поле. Приведены результаты вычислений для ЭДЖ в  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  квантовых ямах. Выявлено влияние магнитного поля на свойства и стабильность ЭДЖ в зависимости от концентрации германия в слое SiGe. Найдено, что равновесная плотность электронно-дырочных пар сильно возрастает с увеличением магнитного

поля. Показано, что зависимости факторов заполнения уровней Ландау от магнитного поля имеют форму плато.

В разделе 2.6 исследуются свойства ЭДЖ в пленках алмаза с толщиной в несколько нанометров. 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. На основе этих результатов двумя методами проведена оценка критической температуры ЭДЖ, которая в (111) пленках алмаза близка к комнатной температуре.

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

В разделе 3.1 проведено сравнение полученных результатов с точными результатами. Вычисленные значения энергии оказались близки к точным значениям, и получены такие же магические числа и их периоды  $\Delta M = N$  и  $\Delta M = N - 1$ , как и в точных вычислениях.

В результате 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. Исследовано влияние заряженной примеси на электронную структуру квантовых точек и определено, что примесь изменяет основное состояние и частично разрушает набор магических чисел для полного углового момента электронов.

При низких средних плотностях электронов электронная плотность является неоднородной, даже при значении фактора заполнения, близким к

единице. Такая неоднородность плотности объясняется увеличением роли обменного взаимодействия при низких плотностях электронов.

В разделе 3.2 изучена зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля. Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока. Показано, что с увеличением плотности электронов влияние кулоновского взаимодействия на характеристики незатухающих токов уменьшается. Показана возможность возникновения осцилляций незатухающего тока при изменении магнитного поля в двумерных квантовых точках. Природа этих осцилляций связана с электрон-электронным взаимодействием. Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока. Период осцилляций по магнитному полю уменьшается с увеличением  $N$ , однако период по магнитному потоку через квантовую точку слабо зависит от  $N$ .

В разделе 3.3 изучался переход металл-диэлектрик в двумерном электронном газе. Вычисления показали, что для фактора заполнения уровня Ландау  $\nu = 1$  при низких плотностях электронов на положительно заряженной примеси локализуются два электрона, волновые функции которых практически не перекрываются с волновыми функциями других электронов. В этом случае переход металл-диэлектрик будет наблюдаться в двумерном слое с концентрацией примесей  $N_i$  в два раза ниже, чем концентрация электронов. Согласно этому результату в координатах  $N_i/N_e - 1/\nu$  построена фазовая диаграмма перехода металл-диэлектрик в двумерном электронном газе.

**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.

В разделе 4.1 проведено сравнение полученных результатов с точными результатами. Расхождение с точными результатами составило 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.

В разделе 4.2 рассматривается необычное явление – наблюдение холловского плато при факторе заполнения уровня Ландау  $\nu=1$  в двуслойных структурах с нулевой туннельной щелью. На основе численных расчетов 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 разделе 4.3 используется теория функционала плотности для вычисления полной энергии пространственно разделенных электронно-дырочные квантовых слоев с конечным числом электронно-дырочных пар в перпендикулярном магнитном поле. Для этого численно решались уравнения Кона-Шэма для двумерных электронов и дырок. Найдено, что прямые электронно-дырочные комплексы могут содержать большое число электронно-дырочных пар, и с увеличением межслоевого расстояния число частиц в комплексе уменьшается.

В разделе 4.4 вычисляются незатухающие токи и полная энергия пространственно разделенных двумерных спин-поляризованных электронов и дырок в поперечном магнитном поле  $B$ . Как и в разделе 4.3 используется теория функционала плотности. Электронные и дырочные слои связаны только кулоновским взаимодействием. 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.



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.

В разделе 5.1 численными и аналитическими методами исследуется переход электронов в спин-поляризованное состояние в квантовой проволоке. На основе численных решений уравнений Кона-Шэма в координатах ширина квантовой проволоки – критическая плотность построена фазовая диаграмма перехода в спин-поляризованное состояние. Аналитические оценки для квантовой проволоки с различной геометрией хорошо согласуются с численными результатами.

В разделе 5.2 исследуется электронная структура квантовой проволоки при низких плотностях электронов. Показано, что при низких плотностях электронная плотность поперек оси квантовой проволоки имеет один максимум. Совсем другая ситуация происходит в квантовых проволоках в сильном магнитном поле. В магнитном поле при низких плотностях электронная плотность имеет два максимума и в центре квантовой проволоки она практически равна нулю, т. е. квантовая проволока разбивается на две туннельно-связанные проволоки.

В разделе 5.3 получено аналитическое выражение для энергии 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.

# 1 Литературный обзор

## 1.1 Общий формализм теории функционала плотности

До появления теории функционала плотности (ТФП) большинство методов, учитывающих многочастичное взаимодействие, носили эмпирический характер. Известные методы Томаса-Ферми, Томаса-Ферми-Дирака, Х $\alpha$  - метод и другие методы при решении многих задач давали неплохие результаты. Однако в эти методы часто приходится вводить поправки, строго обосновать которые практически невозможно. Ситуация изменилась после опубликованной в 1964 г работы Хоэнберга и Кона [1].

ТФП и её применения подробно изложены во многих статьях и монографиях [2, 3]. Далее будут приведены уравнения Кона-Шэма [1, 4]. Свойства электронного газа можно характеризовать электронной плотностью:

$$n(r) = N \sum \int dr_2 \dots \int dr_N |\Psi(r, s_1, \dots, r_N, s_N)|^2, \quad (1.1)$$

где  $N$  – число частиц,  $s$  – спин,  $\Psi$  – многочастичная волновая функция.

Авторы работы [1] показали, что полная энергия многоэлектронной системы во внешнем потенциале  $V(r)$  есть однозначный функционал плотности электронов  $n(r)$ :

$$E_v[n(r)] = \int V(r)n(r)dr + F[n(r)] \quad (1.2)$$

где потенциал  $V(r)$  рассматривается как внешний, а функционал  $F[n]$  в общем случае не известен.

На практике используются различные приближения для  $F[n]$ , которые могут приводить к уравнениям Хартри, Томаса–Ферми, Слэтера.

Обычно из  $F[n]$  вычитают кулоновскую энергию и кинетическую энергию невзаимодействующих электронов, тогда функционал  $E_v[n]$  запишется в виде

$$E_v[n] = T[n] + \frac{1}{2} \frac{e^2}{k} \int \frac{n(r)n(r_1)}{|r - r_1|} dr_1 dr + E_{xc}[n] + \int V(r)n(r)dr, \quad (1.3)$$

где  $T[n]$  - кинетическая энергия невзаимодействующих электронов,  
 $E_{xc}[n]$  - обменно-корреляционная энергия.

Второе слагаемое в уравнении (1.3) есть кулоновская энергия электронов,  
 $k$  - диэлектрическая проницаемость.

Трудность ТФП состоит в том, что вид  $E_{xc}[n]$  в общем случае неизвестен. Создание эффективных методов для определения вклада обмена и корреляции до сих пор является актуальной задачей исследований. На практике используют различные приближения для обменно-корреляционной энергии.

Варьируя функционал (1.3) при условии  $\int n(r)dr = N$ , где  $N$  полное число электронов в системе, получаем одно-частичное уравнение Шредингера [4]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right\} \Psi_i = E_i \Psi_i(r) \quad (1.4)$$

$$\text{где } V_{eff}(r) = V(r) + \frac{e^2}{k} \int d\mathbf{r}_1 \frac{n(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + \frac{\delta E_{xc}}{\delta n}, \quad (1.5)$$

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(r)|^2, \quad (1.6)$$

Система уравнений (1.4)-(1.6) называется уравнениями Кона-Шэма.

Из уравнения (1.4) получаем:

$$T[n] = \sum_i E_i N_i - \int V_{eff}(r) n(r) dr \quad (1.7)$$

Отсюда, согласно (1.3) для полной энергии получаем следующее выражение:

$$E_V[n] = \sum_i E_i N_i - \int V_{eff}(r) n(r) dr + \frac{1}{2} \frac{e^2}{k} \int \frac{n(r)n(r_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r} + E_{xc}[n] + \int V(r)n(r)dr, \quad (1.8)$$

В общем случае вид выражения для  $E_{xc}[n]$  неизвестен. В дальнейшем для обменно-корреляционной энергии будем использовать приближение локальной плотности (ПЛП):

$$E_{xc}[n] = \int \varepsilon_{xc}(n) ndr \quad (1.9)$$

где  $\varepsilon_{xc}(n)$  - обменно-корреляционная энергия на один электрон для однородного электронного газа.

ПЛП хорошо работает для систем с медленно меняющейся плотностью. Как правило, реальные системы не удовлетворяют этому требованию. Однако, расчеты, основанные на ТФП с использованием ПЛП, приводят к удовлетворительным результатам для большинства систем. Более того, учет нелокальных поправок (например, градиентное разложение) ухудшает результаты.

Практика показывает, что точные решения уравнений Кона-Шэма, с использованием ПЛП, дают значительно лучшие результаты, чем другие методы. В таблице 1 приведены экспериментальные и теоретические значения, полученные в ПЛП, для молекул. Ошибка имеет порядок 5-20%.

Таблица 1. Двухатомные молекулы [5].

Молекула	Энергия связи, эВ		Равновесное межатомное расстояние, $a_0$		Частота колебаний, $\text{см}^{-1}$	
	ПЛП	Эксперимент	ПЛП	Эксперимент	ПЛП	Эксперимент
$\text{N}_2$	7,8	9,9	2,16	2,07	2070	2359
$\text{CO}$	9,6	11,2	2,22	2,13	2090	2170

В таблице 2 приведены экспериментальные и теоретические значения полной энергии различных атомов. Видно, что полные энергии атомов, вычисленная с помощью метода Хартри-Фока достаточно близки к экспериментальным, но теория функционала плотности дает гораздо более точный результат.

Таблица 2. Экспериментальные значения полной энергии атомов результаты расчетов с использованием ТФП и метода Хартри-Фока (ХФ). Все значения энергии в эВ.

Атом	ТФП [6]	ХФ [7]	Эксперимент [8]
He	- 79,00	- 77,82	- 79,00
Be	- 398,99	- 396,47	- 399,04
C	- 1030,12	- 1025,60	- 1030,11
N	- 1486,07	- 1480,32	- 1486,07
Fe	- 34651,59	- 34352,75	- 34651,58
Zn	- 48785,64	- 48377,78	- 48785,65
Kr	- 75724,15	- 74887,12	- 75724,15

В настоящее время ТФП широко используется для изучения основного состояния различных систем – атомов, молекул, твердых тел, поверхностей и границ разделов твердых тел, высокотемпературных сверхпроводников, низкоразмерных систем в различных материалах и т.д.

## 1.2 Точные вычисления для квантовых точек

В настоящем разделе приведен краткий обзор о точных решениях уравнения Шредингера для двумерных электронов в квантовых точках. В квантовых точках носители заряда локализованы в области с размерами от единиц до нескольких десятков или сотен нанометров, следствием чего их энергетический спектр является дискретным.

Наиболее впечатляющие результаты по учету электрон-электронного взаимодействия в двумерных квантовых точках получены в работах [9 - 17], в которых численно решалось многочастичное уравнение Шредингера. Результаты численного решения многочастичного уравнения Шредингера для числа электронов  $N < 10$  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  $\hbar M$ . Эти значения полного углового момента названы магическими числами. Авторы работы [10] нашли, что магические числа имеют период  $\Delta M = N$ . В дальнейшем [13, 17] была найдена новая серия магических чисел с периодом  $\Delta M = N-1$ . Вычисления, представленные в работах [9 - 17] показали, что энергетический спектр электронов в квантовых точках имеет щель, природа которой связана с электрон-электронным взаимодействиями. Точные вычисления показали [13], что, по крайней мере, при факторе заполнения уровня Ландау  $\nu < 0,4$ , электроны кристаллизуются и образуют вигнеровскую молекулу. Если основное состояние электронной системы соответствует магическим числам с периодом  $\Delta M = N-1$ , то электроны имеют полигональную конфигурацию электронов, при которой один электрон находится в центре.

Для двумерных электронов, удерживаемых параболическим потенциалом с частотой  $\omega_0$ , гамильтониан запишется

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2m_e} \left( \mathbf{p}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \right)^2 + \frac{1}{2} m_e \omega_0^2 r_i^2 \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1.10)$$

где  $N$  – число электронов,  $m_e$  – эффективная масса электрона,  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость.

Векторный потенциал берется в симметричной калибровке  $\mathbf{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$ . Зеемановское расщепление не учитывается, т. к. в дальнейшем будут рассматриваться в основном спин-поляризованные электроны (сильные магнитные поля).

На рисунке 1.1 приведены результаты точной диагонализации гамильтониана (3.1) для  $N=3$  [10]. Полный угловой момент электронов на рисунке 1.1 обозначен через  $J$ . Эти результаты показывают важность и необычность вклада электрон-электронного взаимодействия в полную энергию. Энергия электрон-электронного взаимодействия уменьшается с увеличением  $J$  и имеет изломы при определенных значениях  $J$ . Из рисунка 1.1 видно, что основным состоянием будет состояние с  $J=6$ , а состояния с

$J = 3, 9, 12$  являются метастабильными. Таким образом, точные вычисления показывают, что магические числа для полного углового момента имеют период, равный числу электронов  $N$ . В дальнейших работах [11, 12] также были получены периоды равные числу электронов.

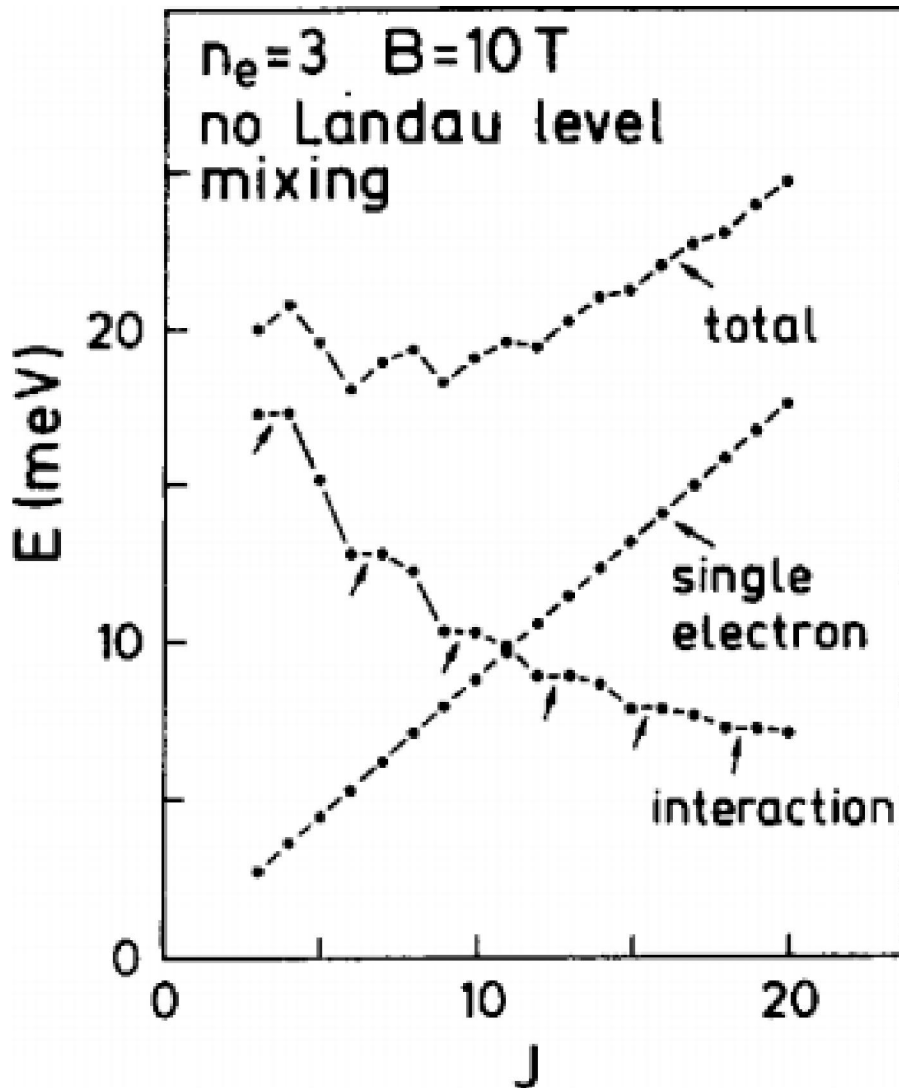


Рисунок 1.1 – Энергия невзаимодействующих электронов (single electron), энергия электрон-электронного взаимодействия (interaction) и полная энергия (total) в зависимости от полного углового момента электронов для  $N=3$ ,  $B=10$  Тл,  $\hbar\omega_0=4$  мэВ (GaAs). Рисунок взят из работы [10]

На рисунке 1.2 приведены результаты, взятые из работы [11] для  $N=4$ . Здесь следует отметить немонотонную зависимость полного спина

электронов при увеличении магнитного поля. В достаточно сильных магнитных полях возможен переход из спин-поляризованного состояния в частично поляризованное состояние и обратно. Как видно из рисунка 1.2, период магических чисел для спин-поляризованных электронов равен числу электронов.

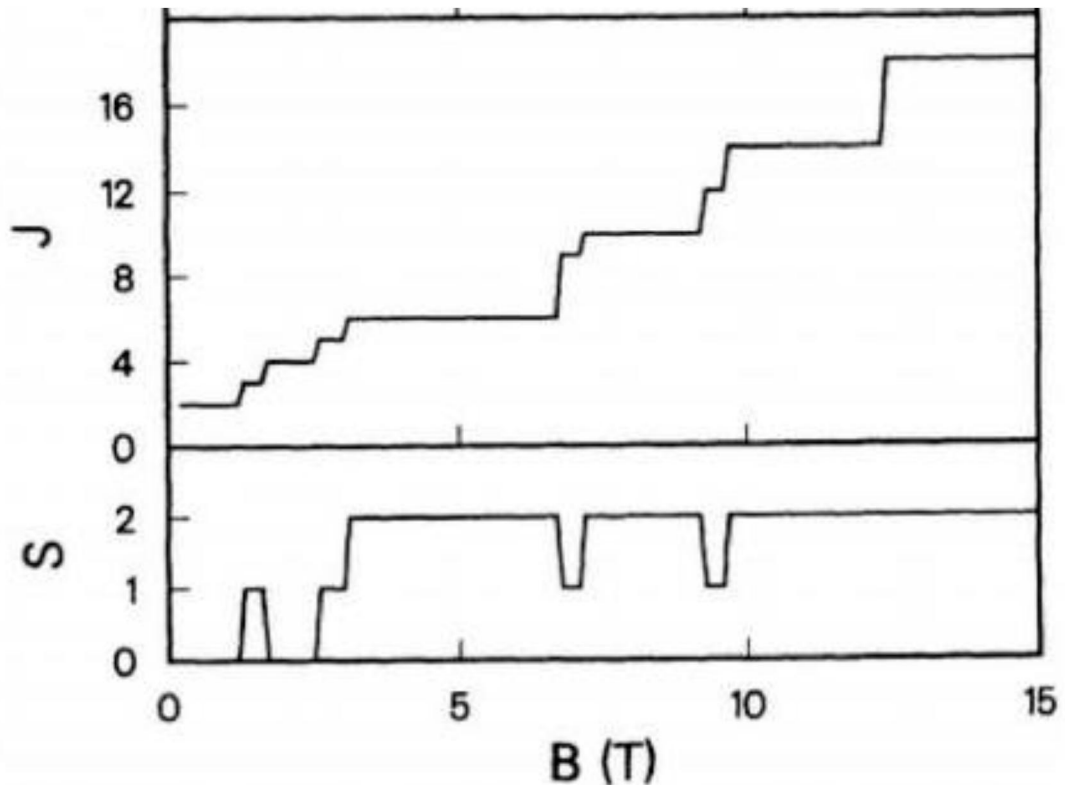


Рисунок 1.2 – Зависимость полного спина  $S$  и полного углового момента электронов  $J$  от магнитного поля для  $N=4$ . Рисунок взят из работы [11]

В работе [13] приведены результаты точного решения многочастичного уравнения Шредингера для  $6 \leq N \leq 9$  в магнитном поле. На рисунке 1.3 показана вероятность распределения электронов

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \langle \Phi_L | \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j}^N \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_0) | \Phi_L \rangle, \quad \text{где} \quad \Phi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) -$$

многочастичная волновая функция,  $r_0$  – координата фиксированного электрона. Кроме точной волновой функции (EXD) для вычислений использовалась приближенная молекулярная волновая функция (RWM) [14, 15]. Отметим, что метод RWM приводит к неплохому согласию с



результатами точных вычислений. В работе [13] показано, что при низких факторах заполнения электроны в квантовой точке имеют кристаллическую структуру. Неожиданно оказалось, что кристаллическая структура сохраняется и для более высоких факторов заполнения (рисунок 1.3). Как видно из рисунка 1.3 один электрон находится в центре квантовой точки, а остальные распределены по кольцу. Такую структуру авторы работы [13] назвали вигнеровской молекулой. Период магических чисел в этом случае будет равен  $N-1$ .

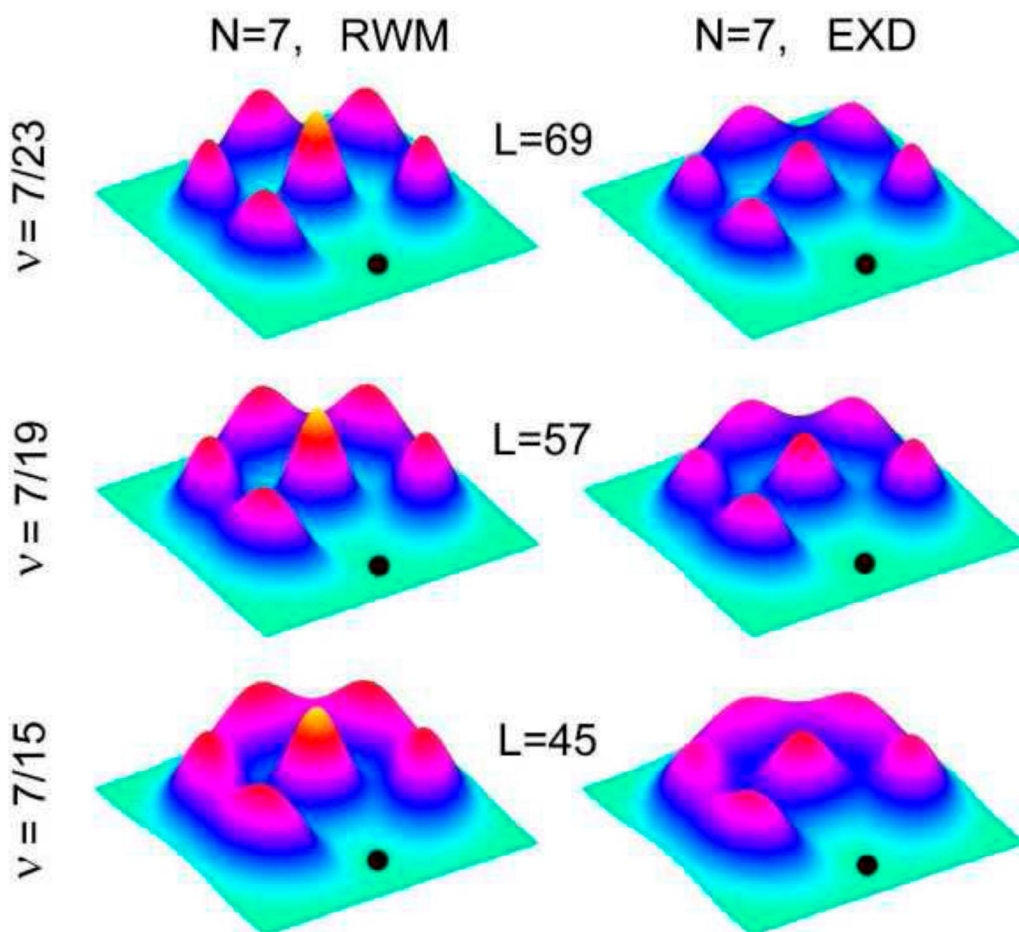


Рисунок 1.3 – Вероятность распределения  $P$  для  $N = 7$  и различных значений полного углового момента  $L$ . Случай точной диагонализации показан в правой колонке, RWM случай – в левой колонке. Значения  $r_0$  показаны точкой. Рисунок взят из работы [13].

### 1.3 Коллективные явления в низкоразмерных системах

В настоящем разделе приведен краткий обзор экспериментальных результатов для явлений и эффектов, которые исследуются теоретически в диссертации.

Исследование свойств электронно-дырочных систем является одной из активно развивающихся областей современной физики конденсированных сред. В настоящее время наибольшее внимание уделяется низкоразмерным электронно-дырочным системам, в которых роль кулоновского взаимодействия увеличивается. Теоретические и экспериментальные работы в этом направлении посвящены в основном системам с конечным числом частиц (экситоны [18, 19], трионы [20, 21] и электронно-дырочные комплексы с числом частиц менее 10 [22, 23]).

Менее изучены свойства квазидвумерной ЭДЖ в полупроводниковых структурах, в частности в структурах с гетеропереходами второго рода [84, 85]. Впервые возможность образования квазидвумерной ЭДЖ в МОП-структурах в кремнии показана в работах [24, 25]. Недавно ЭДЖ обнаружена в квантовых ямах  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  [26, 27] и в гетероструктурах  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  [28-34]. Квантовые ямы  $\text{Si}/\text{SiGe}/\text{Si}$  представляют собой структуры второго рода, в которых слой  $\text{SiGe}$  формирует барьер для электронов и квантовую яму для дырок. Высота барьера при  $x = 0,1$  составляет примерно 10 мэВ, а глубина ямы примерно 90 мэВ.

Экспериментальные результаты указывают на модификацию свойств ЭДЖ в зависимости от содержания германия в слое  $\text{SiGe}$ . В частности, в работе [34] экспериментально была обнаружена необычная структура в спектре излучения ЭДЖ в квантовых ямах  $\text{SiGe}/\text{Si}$  с малым содержанием германия (несколько процентов). Объяснить форму линии конденсированной фазы удалось в рамках представлений о многокомпонентной ЭДЖ, содержащей как тяжелые, так и легкие дырки. Отметим, что обнаруженная тонкая структура спектров излучения ЭДЖ исчезает по мере увеличения содержания германия в квантовой яме.

В работах [33, 34] исследована тонкая структура спектральных линии фотолюминесценции квазидвумерной электронно-дырочной жидкости в напряжённых гетероструктурах. Исследуемые образцы представляли собой SiGe/Si гетероструктуры с одиночными квантовыми ямами с шириной  $d = 5$  нм. Рисунок 1.4 иллюстрирует спектры излучения ЭДЖ в видимом ( $2E_g$ ) и инфракрасном (IR) диапазонах при плотности возбуждения  $0.1 \text{ Вт/см}^2$  и температуре  $5 \text{ К}$ . Особенности в комбинированной плотности состояний, определяющей форму линии ЭДЖ, могут быть связаны как с электронной, так и с дырочной

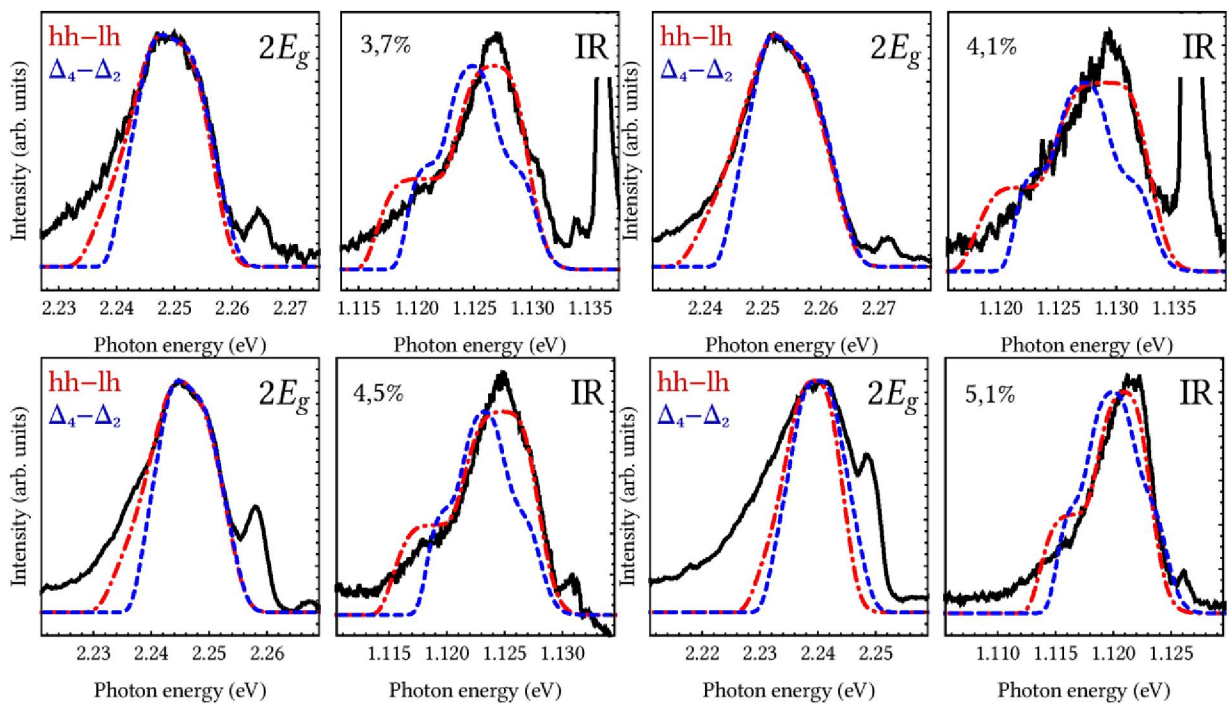


Рисунок 1.4 – Спектры излучения в видимом ( $2E_g$ ) и инфракрасном (IR) диапазонах для структур с квантовыми ямами SiGe/Si с содержанием Ge 3,7–5,1% при плотности возбуждения  $0.1 \text{ Вт/см}^2$  и температуре  $5 \text{ К}$  (сплошные линии). Штрих-пунктирные (пунктирные) кривые — аппроксимация экспериментальных данных моделью жидкости, содержащей легкие и тяжелые дырки ( $\Delta_4$  и  $\Delta_2$  электроны) [34]

подсистемами [33, 34]. В первом случае, дополнительная ступень возникает за счет расщепления электронных долин ( $\Delta_2$ -  $\Delta_4$ ) в слое SiGe, во втором – за счет сосуществования в ЭДЖ легких и тяжелых дырок (hh-lh).

Выбор между двумя моделями ЭДЖ может быть сделан на основе одновременной аппроксимации формы линии ЭДЖ в ИК и 2Eg спектрах. Обработка спектров излучения [34] показала, что особенности, наблюдаемые в спектрах двухчастичной (ИК диапазон) и четырехчастичной (видимый диапазон) рекомбинации объясняются наличием и тяжёлых, и лёгких дырок в конденсированной фазе. Сравнение расчётных и экспериментальных спектров фотолюминесценции ЭДЖ позволило определить плотность электронно-дырочных пар (рисунок 1.5).

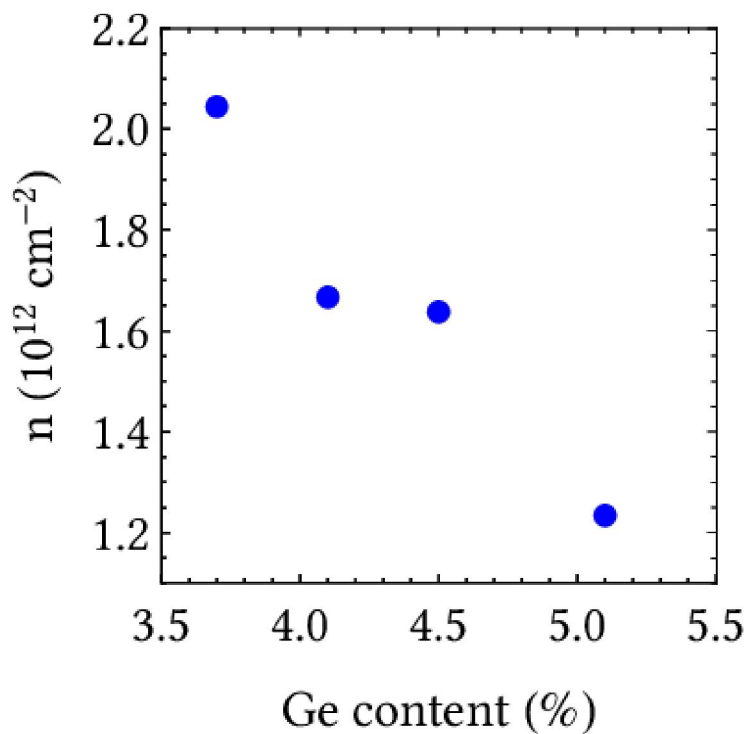


Рисунок 1.5 – Зависимость плотности ЭДЖ от содержания германия [34]

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. Отметим, что подобный эффект давно и активно изучается в сверхпроводящих кольцах (эффект Литтла-Паркса). Осцилляции Литтла-Паркса и осцилляции незатухающего тока в квантовых кольцах связаны с изменением энергии системы в магнитном поле. В частности в двумерных системах с аксиальной симметрией оба эффекта объясняются изменениям углового момента электронов в квантовых кольцах и параметра порядка в сверхпроводниках кольцах.

Теоретическая работа [35] стимулировала исследование незатухающих токов в мезоскопических металлических кольцах. В последние годы этой проблеме посвящено много теоретических [36-42] и экспериментальных работ [43-46].

Считается, что в металлических кольцах для расчета незатухающего тока можно не учитывать взаимодействие электронов [39, 43]. Это предположение подтверждается экспериментальными результатами [43]. На рисунке 1.6 (А-С) представлены зависимости незатухающего тока на одно кольцо от магнитного поля для массивов колец с тремя различными радиусами:  $r = 308$  нм, 418 нм и 793 нм. На рисунке 1.6 (D) показана аналогичная зависимость для одиночного кольца с  $r = 418$  нм. Как видно из рисунка 1.6 величина незатухающего ток уменьшается с увеличением радиуса кольца. Этот результат хорошо согласуется с предсказанием теории [39]. Также получено хорошее согласие экспериментальных и теоретических результатов по периоду осцилляций незатухающего тока [39, 43].

Менее изучены свойства незатухающих токов в полупроводниковых структурах. В теоретических [47-50] и экспериментальных [51-53] работах исследуются свойства незатухающих токов в полупроводниковых квантовых кольцах.

В работе [53] сообщается о измерении незатухающего тока в InAs/GaAs квантовых кольцах. Ансамбль квантовых колец состоит из 29

несвязанных слоев с общим числом  $1,5 \cdot 10^{11}$  квантовых колец. В среднем на каждое кольцо приходится 1,5 электрона. Форма квантовых колец значительно отличается от идеальных колец (рисунок 1.7(a)) и радиус колец составляет 11,5 нм. Потенциал для электронов имеет форму вулкана и показан справа на рисунке 1.8(b).

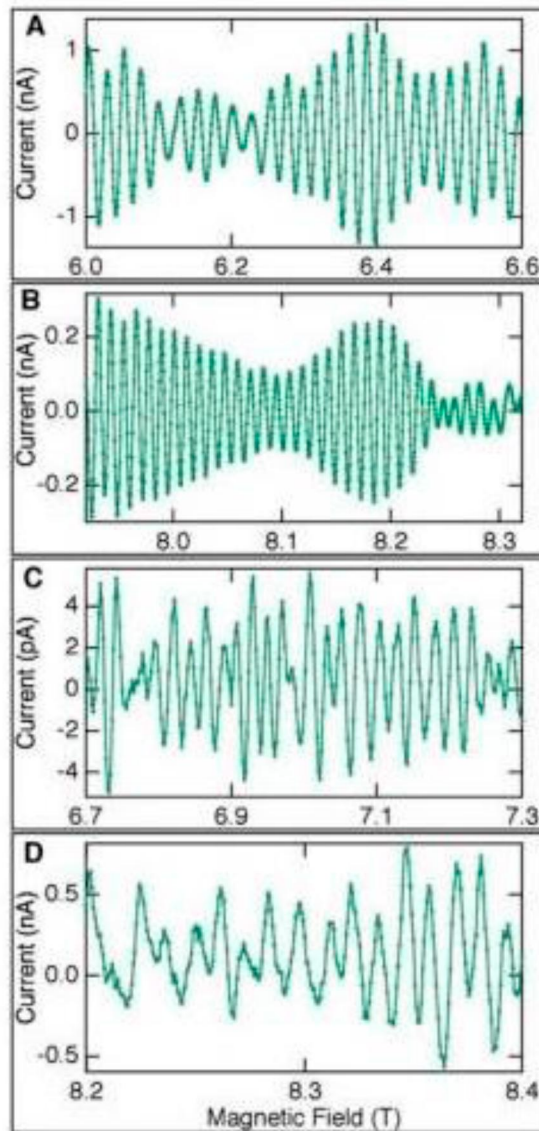


Рисунок 1.6 – Зависимость незатухающего тока : (A) массив колец с радиусом  $r = 308$  нм; (B) массив колец с  $r = 418$  нм; (C) массив колец с  $r = 793$  нм; (D) одиночное кольцо с  $r = 418$  нм. Рисунок взят из работы [43].

Незатухающий ток был определен через магнитный момент электронов в ансамбле квантовых колец. На рисунке 1.8 показана зависимость магнитного момента на один электрон в зависимости от магнитного поля. Первая осцилляция появляется при  $B = 14$  Т. Для того

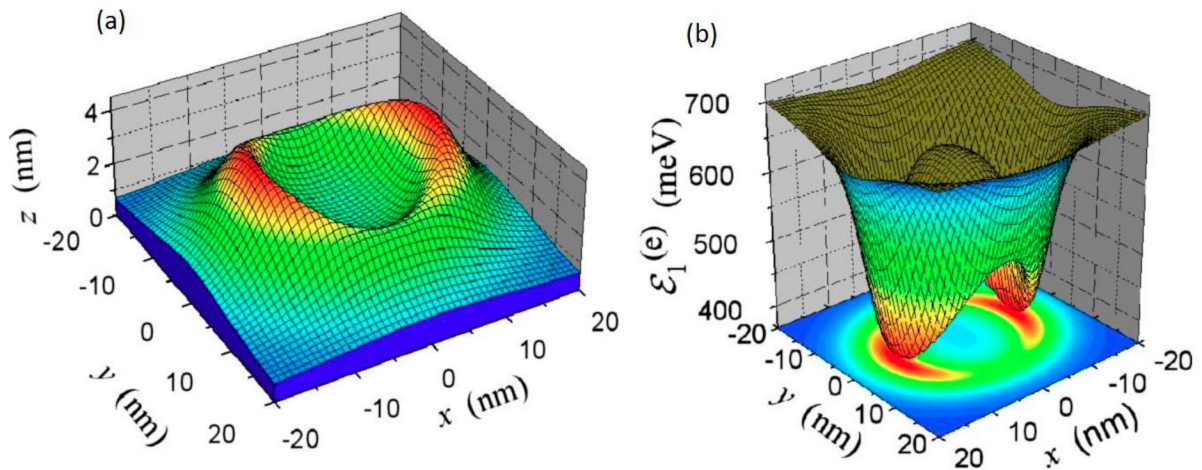


Рисунок 1.7 – Профиль квантового кольца (a) и потенциал для электрона (b) в наноструктуре. Рисунок взят из работы [53]

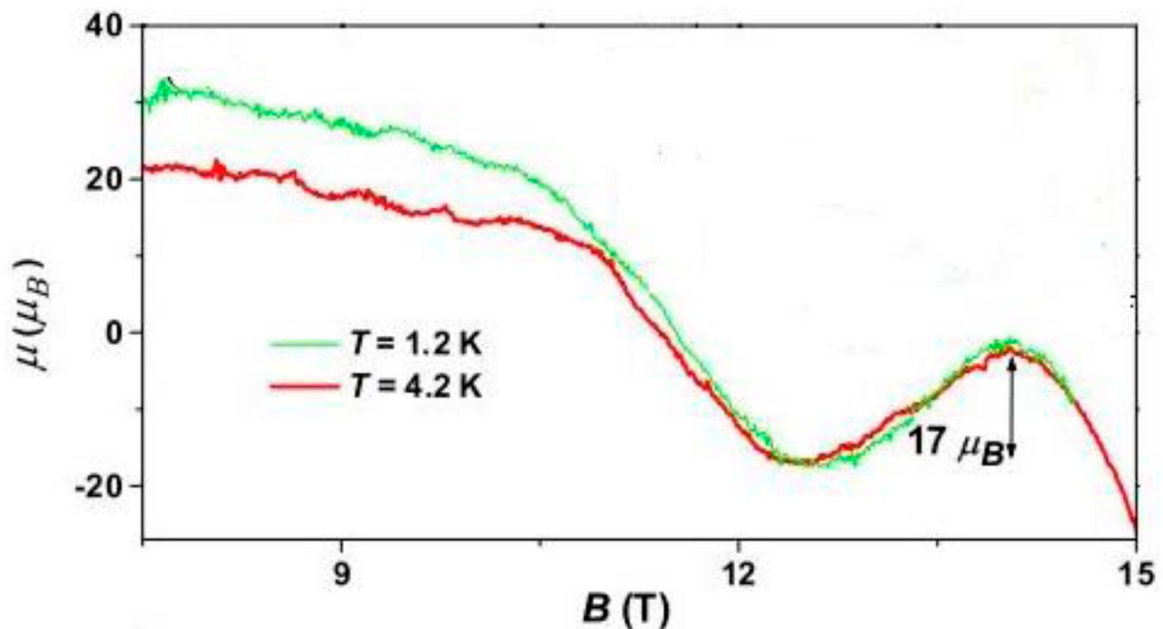


Рисунок 1.8 – Магнитный момент на один электрон в зависимости от магнитного поля. Рисунок взят из работы [53].

чтобы интерпретировать этот результат численно решалось уравнение Шредингера для различных видов удерживающих потенциалов. Спектры энергии электронов в зависимости от магнитного поля показаны на рисунке 1.9. Стрелки на рисунке показывают переход электрона из состояния с  $m=0$  в состояние с  $m=1$ . Для идеального квантового кольца (рисунок 1.9 (a)) переход из одного состояния электрона в другое происходит при  $B = 5$  Т, что далеко от результатов эксперимента. Для квантовой точки в форме диска (рисунок 1.9 (b)) основным состоянием всегда будет состояние с  $m=0$ .

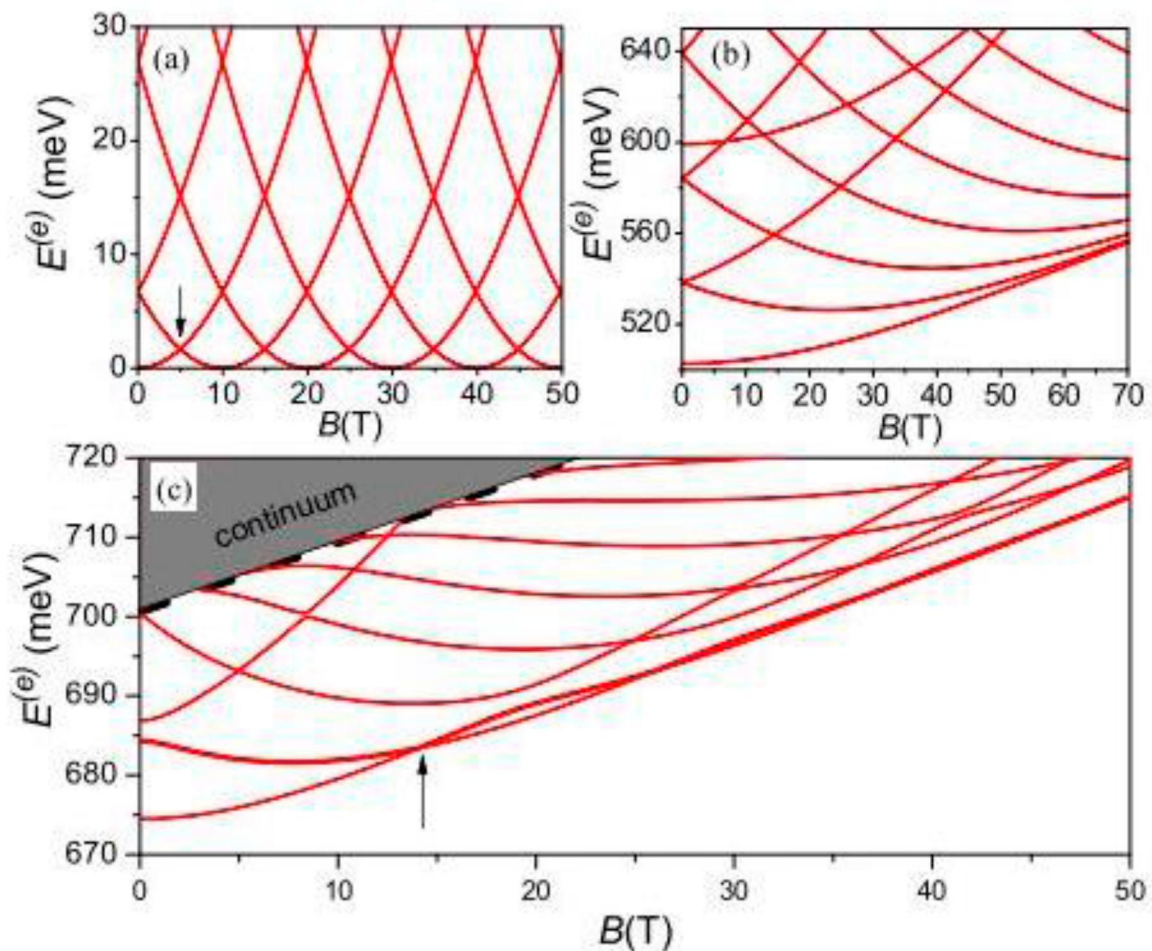


Рисунок 1.9 – Уровни энергии электрона в зависимости от магнитного поля для (a) идеального кольца с радиусом 11,5 нм, (b) квантовой точки в форме диска и (c) реальной вулканоподобной наноструктуре, показанной на рисунке 1.7. Рисунок взят из работы [53]



Энергетический спектр электрона в вулканоподобном потенциале показан на рисунке 1.9 (с). Видно, что переход в новое состояние происходит при  $B = 14$  Тл, что хорошо совпадает с экспериментальным результатом, представленным на рисунке 1.8.

В работах [54, 55] показано, что в кремниевых МОП структурах при низких плотностях двумерного электронного газа происходит переход металл-диэлектрик (см. обзоры [56-58]). Позже переход металл-диэлектрик был обнаружен и в других двумерных системах [57, 58]. Переход от металлического типа проводимости происходит при уменьшении двумерной плотности электронов. Например, в кремниевых МОП структурах этот переход наблюдается при плотностях около  $10^{11} \text{ см}^{-2}$ . При таких низких плотностях важную роль играет электрон-электронное взаимодействие. Экспериментальные данные указывают, что на характеристики перехода металл-диэлектрик влияет спин электрона. Действительно в экспериментальной работе [59] показано, что в параллельном электронному слою магнитном поле температурная зависимость сопротивления меняется с металлической на диэлектрическую. Также стоит отметить влияние примесей на характеристики перехода металл-диэлектрик. В кремниевых МОП структурах критическая плотность электронов увеличивается с уменьшением подвижности электронов [60].

В работе [61] экспериментально изучался переход в диэлектрическое состояние двумерного электронного газа в перпендикулярном магнитном поле. Переход металл-диэлектрик изучался в кремниевых структурах металл-окисел-полупроводник. Полученная зависимость критической концентрации от магнитного поля носит немонотонный характер (рисунок 1.10). До сих пор нет теоретического объяснения немонотонной зависимости границы фазового перехода металл-диэлектрик от магнитного поля. Скейлинговая теория локализации не подтверждается экспериментом

[58]. В настоящее время ясно, что переход металл-диэлектрик связан с сильным электрон-электронным взаимодействием при низких плотностях электронов.

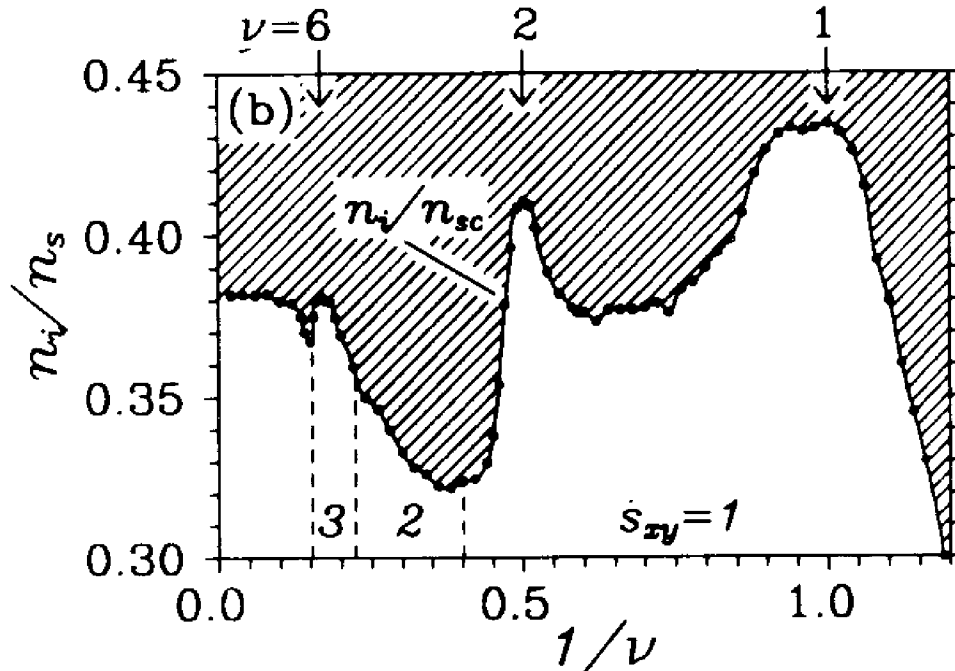


Рисунок 1.10 – Экспериментальная фазовая диаграмма перехода металл-диэлектрик в координатах обратная критическая плотность – обратный фактор заполнения. Диэлектрическая фаза заштрихована. Рисунок взят из работы [61]

Двумерные электроны в сильном магнитном поле являются хорошей системой для исследования многочастичных эффектов. В последние годы для двойных квантовых слоев получены такие интересные результаты как увлечение электронов [63], исчезновение холловского сопротивления при разных направлениях токов в слоях [64, 65], возникновение холловского плато при факторе заполнения уровня Ландау  $\nu = 1$  в структурах с нулевой туннельной щелью [62, 63]. Часто последнее явление объясняется возникновением бозе-конденсата межслоевых экситонов [66, 67]. Однако природа этого явления до конца не выяснена.

Экспериментальные работы [62, 63] 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 1.11). Необычность этого явления заключается в том, что холловское плато с  $\nu = 1$  сохраняется при нулевой туннельной щели (вставка на рисунке 1.11). На вставке рисунка 1.11 показана фазовая диаграмма

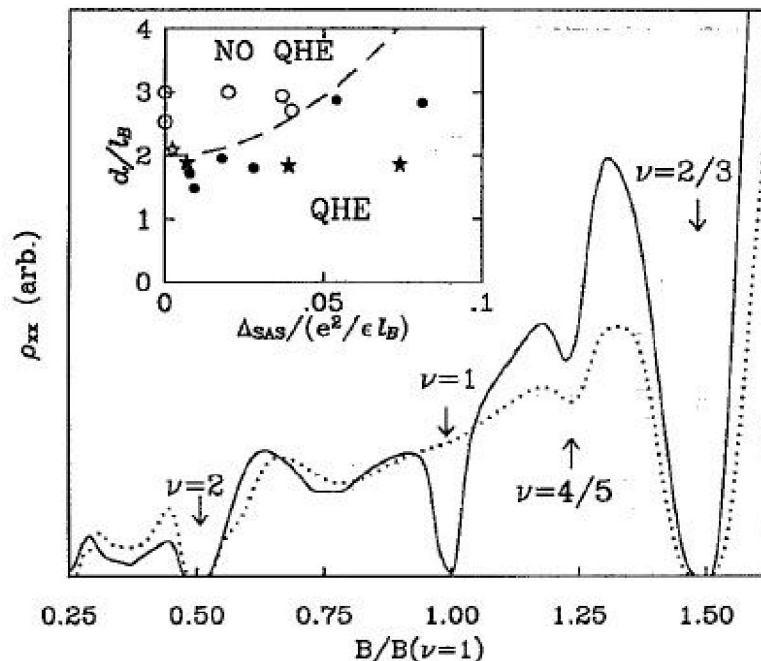


Рисунок 1.11 – Зависимость диагонального сопротивления от магнитного поля для двух образцов. В одном образце ( $d = 3$  нм,  $N_e = 1,26 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) квантовый эффект Холла при  $\nu = 1$  наблюдается, в другом ( $d = 4$  нм,  $N_e = 1,45 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) – отсутствует. 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 [62]

перехода в КХС с  $\nu = 1$ . 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 [63] показали, что критическое отношение  $d/l_B$ , ниже которого КХС при  $\Delta_{sas} = 0$  существует, несколько меньше. На рисунке 1.12 приведены результаты такого эксперимента. Плотности электронов в каждом слое равны  $N_1 = N_2$ . Видно, что при понижении плотности электронов возникает холловское плато при  $\nu = 1$ . Причем плато образуется при  $d/l_B < 1,7$ .

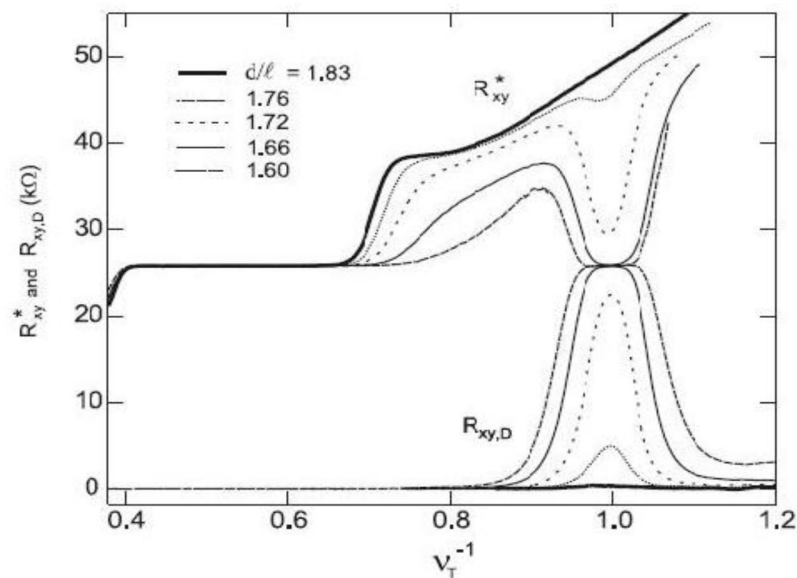


Рисунок 1.12 – Зависимость холловского сопротивления от обратного фактора заполнения. Плотности в каждом слое  $N_1 = N_2 = 2,6 \ 2,8 \ 3,0 \ 3,2 \ 3,4 \ 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . Рисунок взят из работы [63]

## Глава 2

### Стабильность квазидвумерной электронно-дырочной жидкости в полупроводниковых структурах

#### 2.1 Электронно-дырочная жидкость в мелких и глубоких квантовых ямах. Аналитические вычисления.

Для вычисления энергии и равновесной плотности квазидвумерной ЭДЖ используется теория функционала плотности. Для учета обменно-корреляционной энергии используется стандартное приближение локальной плотности. Ранее теория функционала плотности успешно применялась для изучения свойств трехмерной ЭДЖ в полупроводниках (см. обзоры [68, 69]).

Необходимо вычислить полную энергию квазидвумерной электронно-дырочной системы:

$$E_t[n_e, n_h] = T_e[n_e] + T_h[n_h] + \frac{1}{2} \int V_c(z)(n_e(z) - n_h(z))dz + \int U_e(z)n_e(z)dz + \int U_h(z)n_h(z)dz + E_{xc}[n_e, n_h], \quad (2.1)$$

где  $n_e$ ,  $n_h$  – плотности электронов дырок, соответственно,  $T_e$ ,  $T_h$  – кинетические энергии носителей,  $V_c(z)$  – кулоновский потенциал,  $E_{xc}$  – обменно-корреляционная энергия,  $U_e(z)$ ,  $U_h(z)$  – внешние потенциалы для электронов и дырок.

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

Варьируя выражение (2.1) по плотностям  $n_e$  и  $n_h$ , получим два уравнения Шредингера:

$$\left( -\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff,i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (2.2)$$

где  $i=e,h$ .

Таким образом, проблема сводится к решению двух одномерных нелинейных уравнений Шредингера для частиц в первой и во второй ямах, которые описываются потенциалами  $V_{eff,e}(z) = V_c(z) + V_{xc,e}(z) + U_e(z)$  и  $V_{eff,h}(z) = -V_c(z) + V_{xc,h}(z) + U_h(z)$ , где  $V_{xc}(z)$  – обменно-корреляционный потенциал, а электростатический потенциал получен из уравнения Пуассона:

$$V_c(z) = 8\pi \int_{-\infty}^z (z-z')[n_h(z') - n_e(z')]dz' , \quad (2.3)$$

Внешние потенциалы для электронов и дырок задаются выражением:

$$U_i(z) = \begin{cases} 0, & |z| \leq d/2 \\ U_i, & |z| > d/2 \end{cases} , \quad (2.4)$$

где  $d$  – ширина ямы (барьера).

Такой выбор внешних потенциалов дает отсчет энергии от ширины запрещенной зоны полупроводника создающего квантовую яму (барьер). Для гетероструктуры 2 рода имеем  $U_e < 0$  и  $U_h > 0$ .

Когда заполнен только нижний уровень размерного квантования, плотности носителей задаются выражениями:

$$n_e(z) = N_e \psi_{0,e}^2(z) , \quad n_h(z) = N_h \psi_{0,h}^2(z) , \quad (2.5)$$

где  $N_e, N_h$  – двумерные плотности электронов и дырок, соответственно.

В дальнейшем индекс “0” у переменных будем опускать.

Кинетическая энергия запишется в следующем виде:

$$T_i[n_i] = \frac{\pi\mu}{g_i m_{d,i}} N_i^2 + N_i (E_i - \int V_{eff,i}(z) \psi_i^2(z) dz) , \quad (2.6)$$

где  $g_i$  – число эквивалентных долин,  $m_{d,i} = (m_{x,i} m_{y,i})^{1/2}$ .

В выражении (2.6) первое слагаемое соответствует полной кинетической энергии носителей вдоль электронно-дырочного слоя, а второе – кинетической энергии поперек слоя. В дальнейшем для простоты считаем, что  $g_h = 1$ , массы дырок изотропны  $m_h = m_{z,h} = m_{d,h}$  и введем обозначения  $m_z = m_{z,e}$ ,  $m_d = m_{d,e}$ .

Для обменно-корреляционной энергии используем приближение локальной плотности:

$$E_{xc}[n_e, n_h] = \int dz e_{xc}(n_e, n_h), \quad (2.7)$$

где  $e(n_e, n_h)$  – обменно-корреляционная энергия электронов и дырок на единицу объема.

Тогда обменно-корреляционные потенциалы имеют вид:

$$V_{xc,e}(z) = \frac{de_{xc}}{dn_e}, \quad V_{xc,h}(z) = \frac{de_{xc}}{dn_h}. \quad (2.8)$$

В общем случае вид выражения для  $e_{xc}$  неизвестен. В случае нейтральной электронно-дырочной плазмы  $n_e(z) = n_h(z) = n(z)$  для обменно-корреляционной энергии  $\varepsilon_{xc} = e_{xc}/n$  имеется аппроксимационная формула [70]:

$$\varepsilon_{xc} = \frac{1}{2} \frac{a + br_s}{c + dr_s + r_s^2}, \quad (2.9)$$

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

В общем случае систему нелинейных уравнений Кона-Шэма (2.2) – (2.9) необходимо решать численно. В настоящем разделе построена модель, позволяющая получить аналитический результат для энергии квазидвумерной ЭДЖ [71].

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 (2.9) вблизи  $r_s \approx 1$ ). В рамках данной модели не учитывается кулоновский вклад в энергию. Отметим, что кулоновская энергия всегда повышает полную энергию.

Предположим, что волновая функция дырок определяется только удерживающим потенциалом  $U_h(z)$ , который представляет собой прямоугольную яму с шириной  $d$ . Считаем глубину ямы  $U_h$  для дырок достаточно большой, чтобы взять волновую функцию дырок в виде

$\psi_h(z) = (2/d)^{1/2} \cos(\pi z/d)$ . В дальнейшем энергию будем отсчитывать от уровня энергии дырок.

Для электронов  $U_e(z) = 0$  при  $|z| \leq d/2$ , и в этом случае в уравнении Шредингера остается только обменно-корреляционный потенциал. Для электронов возьмем волновую функцию с параметром  $b$  в виде  $\psi_e(z) = (1/(\pi^{1/2}b))^{1/2} \exp(-z^2/(2b^2))$ . Разложим  $V_{xc,e}(z)$  в ряд и, учитывая только квадратичный член по  $z$ , получим из уравнения Шредингера для электронов  $b = 1,45\mu^{3/5}/(m_z^{3/5}K^{3/5}N_e^{1/5})$ . Уровень энергии для электронов будет равен:  $E_e = -0,95K^{6/5}N_e^{2/5}(m_z/\mu)^{1/5}$ .

После всех этих предположений получаем в итоге энергию на одну электронно-дырочную пару:

$$E_{eh} = -0,69K^{6/5}\left(\frac{m_z}{\mu}\right)^{1/5}N_e^{2/5} - \frac{1,24K}{d^{1/3}}N_h^{1/3} + \pi\frac{\mu}{g_em_d}N_e + \pi\frac{\mu}{m_h}N_h + U_e(1 - \text{erf}(d/2b)) \quad (2.10)$$

В выражении (2.10) первое слагаемое – обменная и поперечная кинетическая энергия электронов, второе – обменная энергия дырок, третье – продольная кинетическая энергия электронов, четвертое – продольная кинетическая энергия дырок и последнее слагаемое – энергия электронов во внешнем потенциале. Для нейтральной ЭДЖ  $N_e = N_h = N$ .

Образование ЭДЖ оказывается возможным, если она стабильна по отношению к распаду на свободные экситоны, т. е. когда энергия связи электронно-дырочной пары, равная  $-E_{eh}$ , больше энергии связи экситона. В работах [72, 73] показано, что в структурах второго рода при  $d > 1$  энергия связи экситона близка к энергии связи трехмерного экситона. Рассмотрим случай изотропных масс и  $g_e = 1$ . В этом случае сумма продольных кинетических энергий электронов и дырок не зависит от масс. В формуле (2.10) последнее слагаемое всегда уменьшает энергию, поэтому чтобы исключить влияние барьера на энергию мы берем  $U_e = 0$ . При равных



массах электрона и дырки энергия связи электронно-дырочной пары меньше энергии связи экситона (кривая 1 на рисунок 2.1) и ЭДЖ образовываться не может. Отметим, что близкий результат получен и для трехмерной ЭДЖ [68]. Как видно из формулы (2.10) для квазидвумерной ЭДЖ энергия связи зависит от анизотропии масс электронов. Влияние анизотропии масс электронов на энергию электронно-дырочной пары показано на рисунке 2.1 (кривая 3). При дальнейшем увеличении отношения  $m_d/m_z$  энергия связи и равновесная плотность увеличиваются. С увеличением числа долин также происходит увеличение энергии связи (кривая 2 на рисунке 2.1). Таким образом, состояние с ЭДЖ может быть энергетически выгодным в полупроводниках с анизотропией масс и (или) большим числом эквивалентных долин.

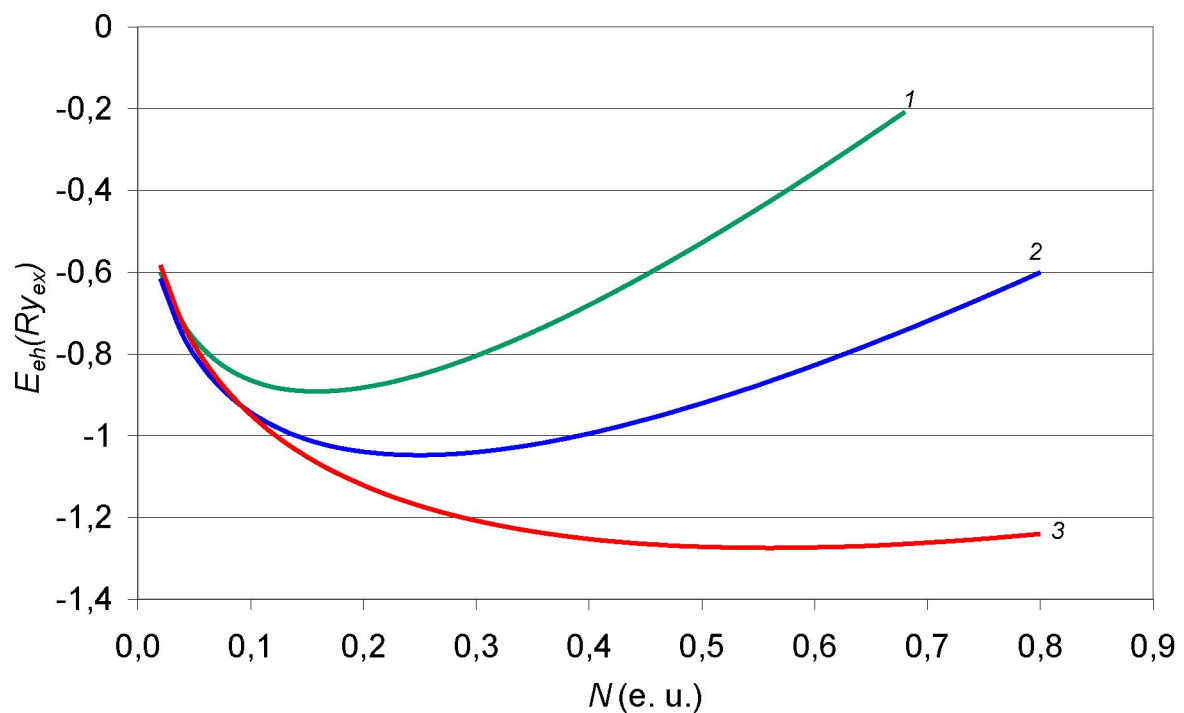


Рисунок 2.1 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной концентрации пар.  $d = 1$ ; 1 –  $m_z = m_d = m_h, g_e = 1$ ; 2 –  $m_z = m_d = m_h, g_e = 2$ ; 3 –  $m_d = m_h = 10m_z, g_e = 1$

Предложенная модель хорошо подходит к гетеропереходам Si/SiGe/Si. Недавние эксперименты [28-32] показали, что в такой структуре может

образовываться квазидвумерная ЭДЖ. Авторами работы [31] было проведено исследование квантовых ям SiGe/Si шириной 5 нм с различным содержанием Ge и показано, что пороговое значение барьера для электронов приблизительно равно 20 мэВ, равновесная плотность равна  $10^{12} \text{ см}^{-2}$  и энергия связи равна 6 мэВ при концентрации Ge около 3%. В этих экспериментах слой SiGe, выращенный на поверхности кремния (100), является напряженным и для вычислений мы использовали следующие параметры [73]:  $g_e = 4$ ,  $m_z = 0,19m_0$ ,  $m_d = 0,42m_0$ ,  $m_h = 0,19m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона). Приведенную массу мы взяли как у кремния  $\mu = 0,126$ , тогда  $a_{ex} = 5$  нм и  $Ry_{ex} = 13$  мэВ.

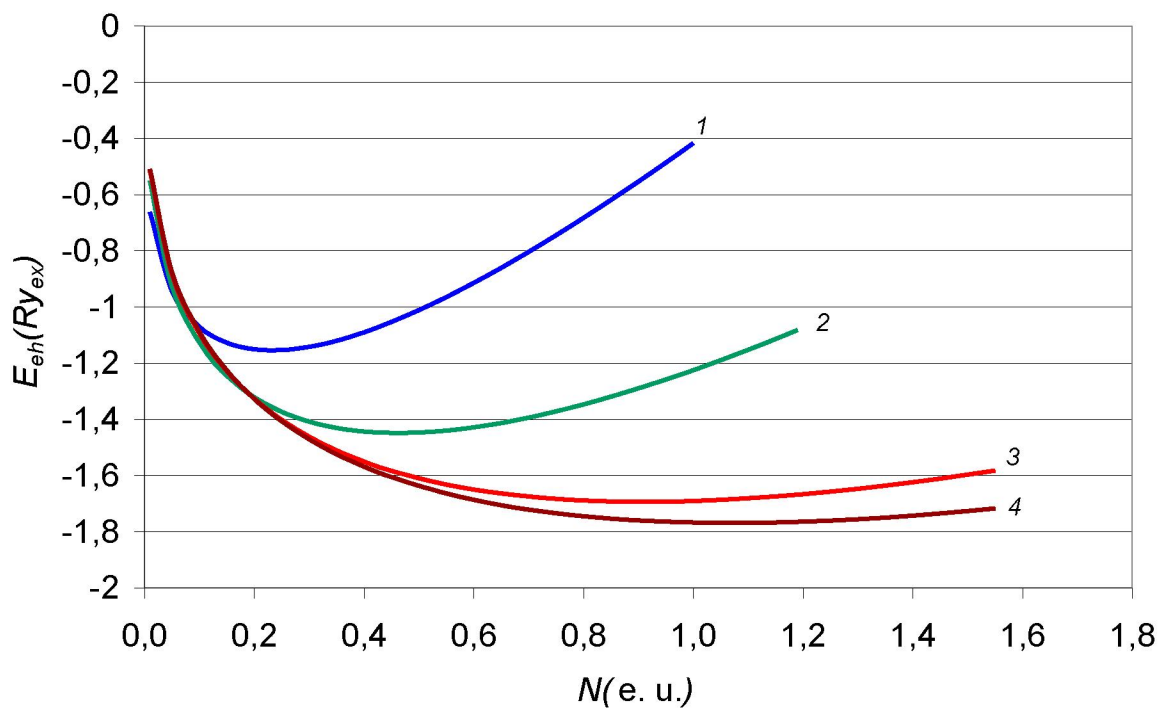


Рисунок 2.2 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной концентрации пар.  $d = 1$ ; кривая 1 – напряженный слой SiGe; кривая 2 – поверхность (100),  $m_z = 0,918m_0$ ,  $m_d = 0,19m_0$ ,  $m_h = 0,53m_0$ ,  $g_e = 2$ ; кривая 3 – поверхность (110),  $m_z = 0,315m_0$ ,  $m_d = 0,324m_0$ ,  $m_h = 0,53m_0$ ,  $g_e = 4$ ; кривая 4 – поверхность (111),  $m_z = 0,258m_0$ ,  $m_d = 0,358m_0$ ,  $m_h = 0,53m_0$ ,  $g_e = 6$

На рисунке 2.2 приведены зависимости энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной концентрации пар. В случае напряженного

слоя SiGe (кривая 1 на рисунке 2.2) получена равновесная плотность носителей  $N = 0,23$  (около  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ ) и энергия связи равна 1,15 (около 15 мэВ). Равновесная плотность очень хорошо согласуется с экспериментом, а энергия связи несколько отличается.

При малых концентрациях Ge следует ожидать, что для структуры с ненапряженным слоем SiGe эффективные массы носителей заряда и число долин будут как у кремния. На рисунке 2.2 (кривые 2-4) приведены результаты вычислений для различных поверхностей кремния. Для поверхности (100) минимум энергии достигается при  $N_e=0,4$ , что соответствует концентрации  $1,6 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Для поверхности (110) энергия связи электронно-дырочной пары и равновесная плотность значительно увеличивается по сравнению с результатами для поверхности (100). Этот результат связан как с увеличением числа долин, так и с увеличением массы плотности состояний электрона  $m_d$ . Для поверхности (111) энергия связи по сравнению с поверхностью (110) практически не отличается, а равновесная плотность пар незначительно увеличивается. Последний результат в основном связан с увеличением числа долин. Для поверхности (111) равновесная плотность электронно-дырочных пар  $N_{eq} = 410^{12} \text{ см}^{-2}$ . Трехмерную плотность электронно-дырочных пар можно оценить как  $n \approx N_{eq} / d \approx 810^{18} \text{ см}^{-3}$ , что более чем в два раза больше равновесной плотности трехмерной жидкости [68].

Сравнительно недавно была продемонстрирована возможность образования квазидвумерной электронно-дырочной жидкости (ЭДЖ) в квантовых ямах SiGe/Si [28-32, 33, 34]. Спектр такой ЭДЖ в значительной степени формируется структурой валентной зоны, плотность состояний в которой носит немонотонный характер за счет наличия разных дырочных подзон [33, 34]. В то же время, согласно существующим представлениям, появление скачков в плотности состояний должно приводить к появлению дополнительных локальных минимумов на зависимости полной энергии

двухкомпонентной ферми жидкости от ее концентрации. В зависимости от того, какой минимум является главным, будут меняться и свойства ЭДЖ. Насколько известно автору, теоретический анализ эффектов такого типа в современной литературе отсутствует.

Найдем аналитическое выражение для энергии квазидвумерной ЭДЖ при наличии двух типов дырок. Наш теоретический подход аналогичен тому, который мы использовали в работе [71]. Для вычисления энергии ЭДЖ используется метод функционала плотности.

В структурах  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  в слое  $\text{SiGe}$  формируется квантовая яма для дырок и барьер для электронов. При малых  $x$  величина барьера и ямы являются малыми и в дальнейшем влияние барьера и ямы учитываться не будет. Для электронейтральной ЭДЖ с двумя типами дырок полная энергия запишется в виде

$$E_t[n_e, n_h] = T_e[n_e] + T_{hh}[n_{hh}] + T_{hl}[n_{hl}] + \int \Delta_{hl} n_{hl}(z) dz + E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}], \quad (2.11)$$

где  $T_e$ ,  $T_{hh}$ ,  $T_{hl}$  – кинетические энергии электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно,  $E_{xc}$  – обменно-корреляционная энергия,  $\Delta_{hl}$  – расщепление между тяжелыми и легкими дырками,  $n_e$ ,  $n_{hh}$ ,  $n_{hl}$  – плотности электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно.

Варьируя выражение (2.11) по плотностям  $n_e$ ,  $n_{hh}$  и  $n_{hl}$  получим три уравнения Шредингера:

$$\left( -\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{xc,i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (2.12)$$

где  $i=e, hh, hl$ .

Когда заполнен только нижний уровень размерного квантования, плотности носителей задаются выражениями:

$$n_e(z) = N_e \psi_{0,e}^2(z), n_{hh}(z) = N_{hh} \psi_{0,hh}^2(z), n_{hl}(z) = N_{hl} \psi_{0,hl}^2(z), \quad (2.13)$$

где  $N_e$ ,  $N_{hh}$ ,  $N_{hl}$  – двумерные плотности электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно.

В дальнейшем индекс “0” у переменных будем опускать.

Кинетическая энергия запишется в следующем виде:

$$T_i[n_i] = \frac{\pi\mu}{g_i m_{d,i}} N_i^2 + N_i (E_i - \int V_{xc,i}(z) \psi_i^2(z) dz), \quad (2.14)$$

где  $g_i$  – число эквивалентных долин,  $m_{d,i} = (m_{x,i} m_{y,i})^{1/2}$ .

В выражении (2.14) первое слагаемое соответствует полной кинетической энергии носителей вдоль электронно-дырочного слоя, а второе – кинетической энергии поперек слоя.

Как и в работе [71] возьмем  $\varepsilon_{xc,i} = -0,91K / r_{s,i}$ , где  $r_{s,i} = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ ,  $K = 1,3$ . Для каждого вида носителей заряда используем приближение локальной плотности, тогда обменно-корреляционная энергия запишется как

$$E_{xc,i}[n_i] = \int \varepsilon_{xc,i} n_i(z) dz. \quad (2.15)$$

Для такого представления энергии обменно-корреляционный потенциал имеет вид:

$$V_{xc,i}(z) = \frac{d(n_i \varepsilon_{xc})}{dn_i}. \quad (2.16)$$

Для решения уравнения Шредингера используем приближенный метод, предложенный в работе [74]. Для каждого типа носителей заряда возьмем волновую функцию с параметром  $b_i$  в виде

$$\psi_i(z) = (1/(\pi^{1/2} b_i))^{1/2} \exp(-z^2 / (2b_i^2)). \quad (2.17)$$

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

$$b_i = (1,45\mu^{3/5} / (m_{z,i}^{3/5} K^{3/5} N_i^{1/5})), \quad (2.18)$$

$$E_e = -0,95K^{6/5} N_e^{2/5} (m_{z,e} / \mu)^{1/5}, \quad (2.19)$$

$$E_{hh} = -0,95K^{6/5} N_{hh}^{2/5} (m_{z,hh} / \mu)^{1/5}, \quad (2.20)$$

$$E_{hl} = -0,95K^{6/5} N_{hl}^{2/5} (m_{z,hl} / \mu)^{1/5} + \Delta_{hl}. \quad (2.21)$$

Подставляя плотности носителей заряда в уравнение (2.11) и используя выражения (2.13)-(2.21) получаем энергию на одну электронно-дырочную пару [75]:

$$E_{eh} = -0,69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,e}}{\mu} \right)^{1/5} N_e^{2/5} - 0,69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,hh}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hh}^{7/5}}{N_e} - 0,69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,hl}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hl}^{7/5}}{N_e} + \pi \frac{\mu}{g_e m_{d,e}} N_e + \pi \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{N_{hh}^2}{N_e} + \pi \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{N_{hl}^2}{N_e} + \Delta_{hl} \frac{N_{hl}}{N_e}, \quad (2.22)$$

В выражении (2.22) 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.

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

$$E_{hh} + \frac{2\pi\mu N_{hh}}{m_{d,hh}} = E_{hl} + \frac{2\pi\mu N_{hl}}{m_{d,hl}}. \quad (2.23)$$

Из уравнения (2.23) получаем:

$$N_{hl} = N_e \frac{m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} - \frac{m_{d,hh} m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} \frac{E_{hl} - E_{hh}}{2\pi\mu}. \quad (2.24)$$

В случае, если из выражения (2.24) получается  $N_{hl} < 0$ , тогда необходимо брать  $N_{hh} = N_e$  и  $N_{hl} = 0$ .

Вычисления проводились для структуры Si/SiGe/Si. Для вычислений мы использовали следующие параметры [76, 77]:  $\Delta_{hl} = 16,6x$ ,  $g_e = 4$ ,  $g_{hh} = g_{hl} = 1$ ,  $m_{z,e} = 0,198m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,44m_0$ ,  $m_{z,hh} = 0,28m_0$ ,  $m_{d,hh} = 0,2m_0$ ,  $m_{z,hl} = 0,18m_0$ ,  $m_{d,hl} = 0,25m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона).

Вначале рассмотрим ЭДЖ с одним типом дырок. Тогда из выражения (2.22) находим минимум энергии, которому соответствует равновесная плотность электронно-дырочных пар:

$$N_{eh} = 0,037K^2 \frac{(m_{z,e}^{1/5} + m_{z,h}^{1/5})^{5/3}}{\mu^2 (1/g_e m_{d,e} + 1/m_{d,h})^{5/3}}. \quad (2.25)$$

Из выражения (2.25) видно, что равновесная плотность относительно слабо зависит от поперечных масс носителей заряда и сильно зависит от числа долин и продольных масс. Подставляя значения параметров для SiGe, получим равновесную плотность  $N_{eh} = 0,21$ . Отметим, что при  $g_e m_{d,e} \gg m_{d,h}$ , равновесная плотность будет пропорциональна  $m_{d,h}^{5/3}$ , и в SiGe ЭДЖ с легкими дырками будет иметь равновесную плотность в полтора раза больше чем с тяжелыми дырками.

Рассмотрим ЭДЖ с двумя типами дырок в структуре Si/SiGe/Si. Из выражений (2.20) и (2.21), что при близких плотностях легких и тяжелых дырок в разнице уровней энергии дырок можно учитывать только расщепление между тяжелыми и легкими дырками:  $E_{hl} - E_{hh} = \Delta_{hl}$ .

На рисунке 2.3 приведены зависимости энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной концентрации пар  $N$ . 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 [31, 34]. С увеличением  $x$  появляется 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 [34].

Как видно из рисунка 2.3 при малых  $x$  равновесная плотность носителей заряда равна приблизительно  $0,5$  ( $210^{12}$  см<sup>-2</sup>), а в состоянии с тяжелыми дырками равновесная плотность уменьшается примерно в три раза. В области значений  $x = 0,06-0,09$  энергия двухкомпонентной и однокомпонентной ЭДЖ отличается слабо. Это означает, что в системе возможна бистабильность, при которой на свойства ЭДЖ может влиять

слабое внешнее воздействие. Таким внешним воздействием может быть давление, внешнее магнитное или электрическое поле. Например, прикладывая компенсирующее одноосное давление к гетероструктуре, можно менять расщепления дырочных состояний и таким образом изменять состояние ЭДЖ. Наиболее простым способом воздействия на ЭДЖ является приложение внешнего электрического поля.

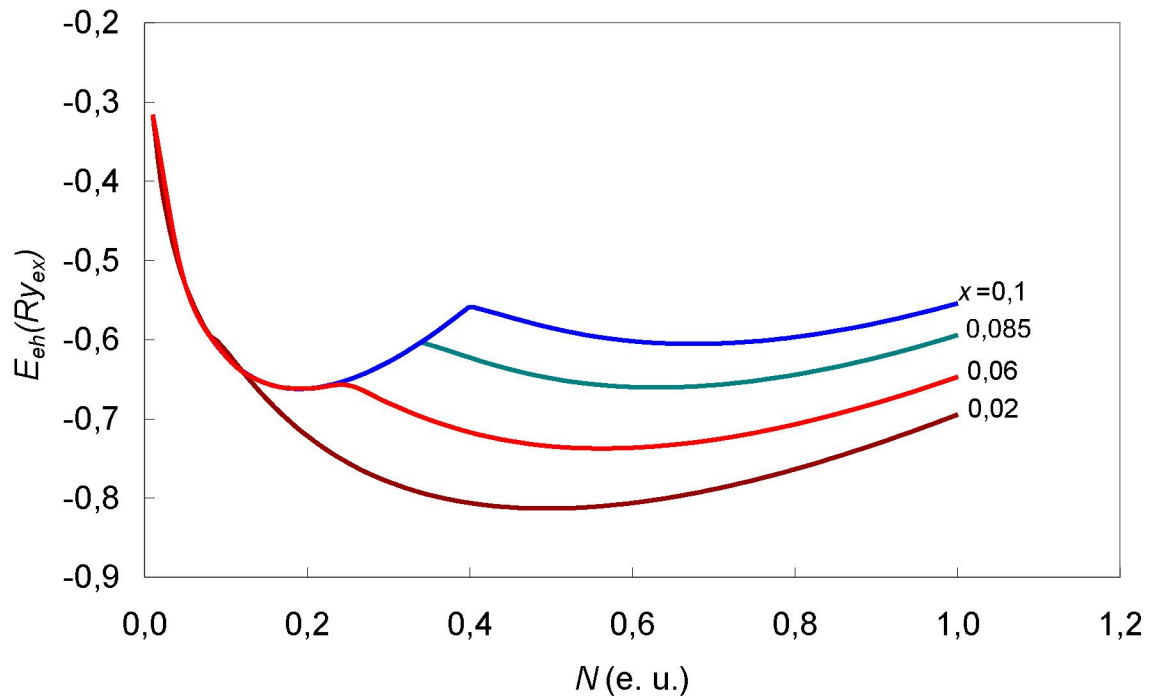


Рисунок 2.3 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для различных значений  $x$

Рассмотрим более подробно влияние внешнего электрического поля на свойства ЭДЖ. При слабом электрическом поле можно воспользоваться предложенной нами моделью. Пусть электрическое поле создается затвором с поверхностным зарядом  $N_t$ . В этом случае условие электронейтральности запишется в виде:  $N_e + N_t = N_{hh} + N_{hl}$ . Для определения плотности легких дырок необходимо воспользоваться уравнением (2.24) с заменой в нем величины  $N_e$  на  $N_e + N_t$ . В случае  $N_t > 0$  ЭДЖ будет положительно заряженной и энергия на одну электронно-дырочную пару запишется как



$$E_{eh} = \frac{E_t(N_e, N_h) - E_t(0, N_t)}{N_e}, \quad (2.26)$$

где  $E_t(N_e, N_h)$  – полная энергия ЭДЖ,  $N_h = N_{hh} + N_{hl}$ .

Для отрицательно заряженной ЭДЖ энергия на одну электронно-дырочную пару имеет вид:

$$E_{eh} = \frac{E_t(N_e, N_h) - E_t(N_t, 0)}{N_h}. \quad (2.27)$$

Результаты вычислений приведены на рисунке 2.4. Мы взяли величину  $x = 0,085$ , при которой минимумы энергии для ЭДЖ с легкими и тяжелыми дырками и только тяжелыми дырками равны. Видно, что при  $N_t = 0,05$  основным состоянием ЭДЖ будет состояние с легкими и тяжелыми дырками. При смене направления электрического поля ЭДЖ переходит в состояние с тяжелыми дырками. Отметим, что при  $N_t > 0$  равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается, а в случае отрицательных  $N_t$  увеличивается.

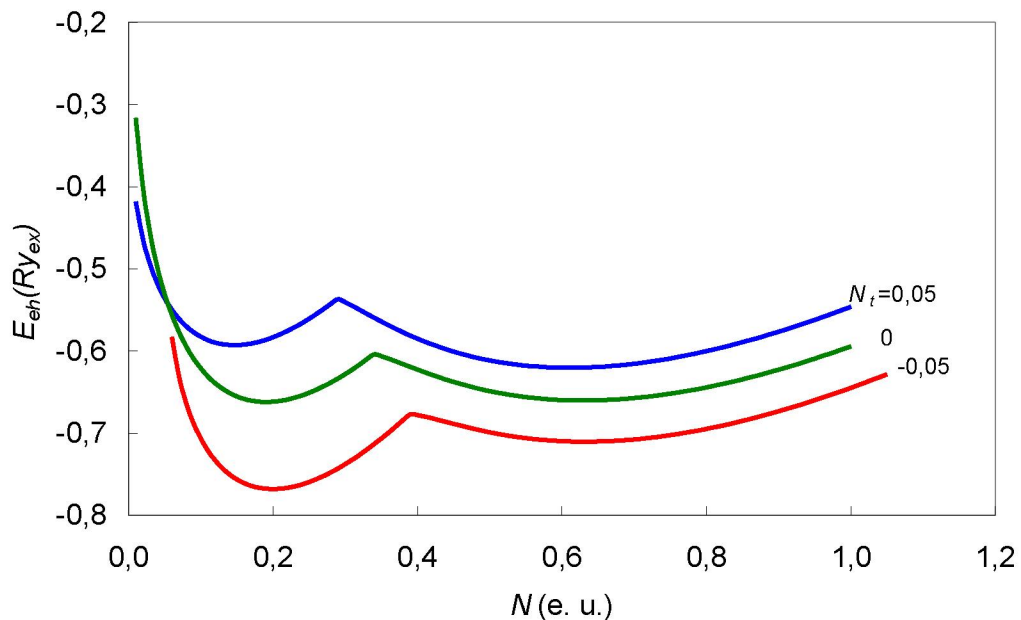


Рисунок 2.4 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар ( $x=0,085$ )

## 2.2 Многокомпонентная электронно-дырочная жидкость в Si/SiGe квантовых ямах. Численное решение уравнений Кона-Шэма.

Квантовые ямы Si/SiGe/Si представляют собой структуры второго рода, в которых слой SiGe формирует барьер для электронов и квантовую яму для дырок. В экспериментальных работах [33, 34] показано, что в мелких квантовых ямах (низкая концентрация германия) образуется трехкомпонентная ЭДЖ, которая содержит электроны, легкие и тяжелые дырки.

Вычислим энергию квазидвумерной ЭДЖ в квантовых ямах SiGe/Si при наличии двух типов дырок. Для вычисления энергии ЭДЖ используется теория функционала плотности.

Рассмотрим квазидвумерную ЭДЖ с электронами, легкими и тяжелыми дырками [81]. Полную энергию для такой электронно-дырочной системы запишем в виде:

$$E_t[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = T_e[n_e] + T_h[n_{hh}] + T[n_{hl}] + \frac{1}{2} \int V_c(z)(n_e(z) - n_h(z))dz + \int U_e(z)n_e(z)dz + \int U_{hh}(z)n_{hh}(z)dz + \int U_{hl}(z)n_{hl}(z)dz + E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}], \quad (2.28)$$

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,  $n_h = n_{hh} + n_{hl}$ .

В экситонной системе единиц уравнения Кона-Шэма для квазидвумерных электронов, легких и тяжелых дырок запишутся в следующем виде [2, 78]

$$\left( -\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff,i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (2.29)$$

где  $i=e, hh, hl$ .

Проблема сводится к решению трех одномерных нелинейных уравнений Шредингера с потенциалами  $V_{eff,e}(z) = V_c(z) + V_{xc,e}(z) + U_e(z)$ ,  $V_{eff,hh}(z) = -V_c(z) + V_{xc,hh}(z) + U_{hh}(z)$  и  $V_{eff,hl}(z) = -V_c(z) + V_{xc,hl}(z) + U_{hl}(z)$ , где  $V_{xc}(z)$  – обменно-корреляционный потенциал, а электростатический потенциал находится из выражения (2.3).

Внешние потенциалы для электронов и дырок задаются выражением:

$$U_i(z) = \begin{cases} \Delta_i, & |z| \leq d/2 \\ V_i, & |z| > d/2 \end{cases}, \quad (2.30)$$

где  $d$  – ширина ямы (барьера).

Величина  $\Delta_i$  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  $V_{hl} > 0$ .

Когда заполнен только нижний уровень размерного квантования, плотности носителей задаются выражениями:

$$n_e(z) = N_e \psi_{0,e}^2(z), \quad n_{hh}(z) = N_{hh} \psi_{0,hh}^2(z), \quad n_{hl}(z) = N_{hl} \psi_{0,hl}^2(z), \quad (2.31)$$

где  $N_e$ ,  $N_{hh}$ ,  $N_{hl}$  – двумерные плотности электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно.

Кинетическая энергия находится из выражения (2.6).

Для обменно-корреляционной энергии используем следующее приближение [79]:  $E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = E_{xc}[n_e, n_h]$ . Тогда в приближение локальной плотности обменно-корреляционные потенциалы имеют вид:

$$V_{xc,e}(z) = \frac{d(n_e \varepsilon_{xc})}{dn_e}, \quad V_{xc,hh}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hh}}, \quad V_{xc,hl}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hl}}. \quad (2.32)$$

Для обменно-корреляционной энергии  $\varepsilon_{xc}$  используется выражение (2.9). Здесь рассматривается электронейтральная ЭДЖ, когда  $N_e = N_{hh} + N_{hl} = N$ . Энергию на одну электронно-дырочную пару будем отсчитывать от нижнего уровня энергии тяжелой дырки  $E_{hh}$  в пустой яме:  $E_{eh} = -E_{hh} + E_t/N$ .

Для электронейтральной ЭДЖ плотности легких и тяжелых дырок находятся из (2.23) и (2.24).

Вычисления проводились для структуры  $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}/\text{Si}$ . Для вычислений мы использовали следующие параметры [76, 77]:  $\Delta_{hl} = 16,6x$ ,  $g_e = 4$ ,  $g_{hh} = g_{hl} = 1$ ,  $m_{z,e} = 0,198m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,44m_0$ ,  $m_{z,hh} = 0,28m_0$ ,  $m_{d,hh} = 0,2m_0$ ,  $m_{z,hl} = 0,18m_0$ ,  $m_{d,hl} = 0,25m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона),  $V_e = -7,7x$ ,  $V_{hh} = V_{hl} = 53,7x$ .

Результаты численного решения уравнений Шредингера приведены на рисунке 2.5. Видно, что волновые функции легких дырок и электронов перекрываются сильнее, чем тяжелых дырок и электронов. Поэтому наличие легких дырок в ЭДЖ приводит к понижению энергии из-за уменьшения кулоновской энергии. Неполное перекрытие волновых функций электронов и дырок приводит к образованию для электронов притягивающего кулоновского потенциала, который превосходит величину барьера для электронов. Из результатов, представленных на рисунке 2.5, видно, что кулоновский потенциал в центре квантовой ямы имеет

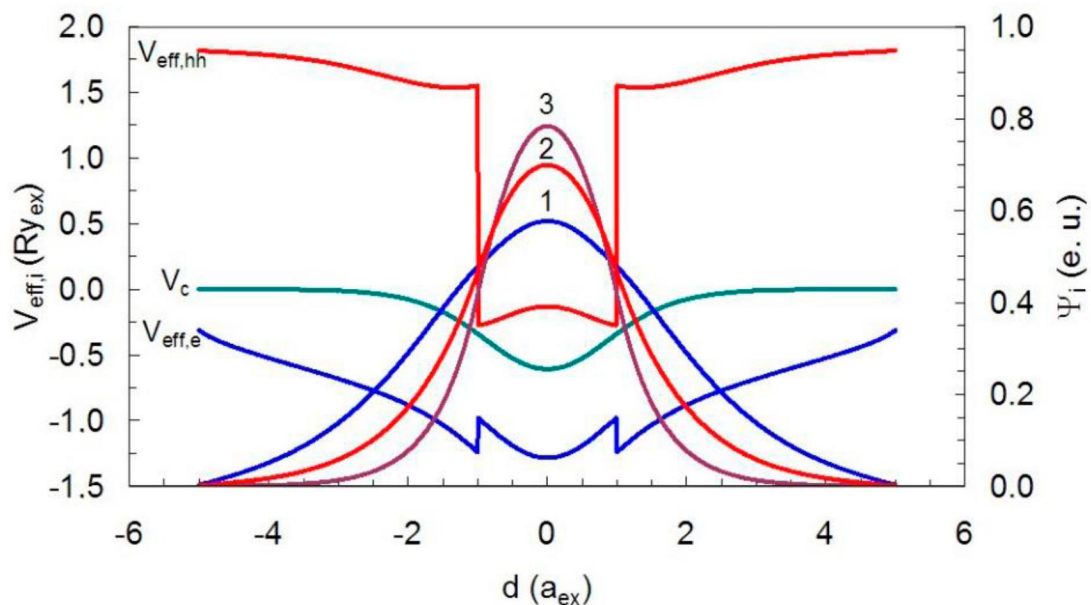


Рисунок 2.5 – Профили потенциалов и волновых функций электронов (1), тяжелых дырок (3) и легких дырок (2).  $N = 0,29$ ,  $N_{hl} = 0,082$ ,  $x = 0,034$ ,  $d = 2$

величину порядка  $-0,6 Ry_{ex}$ , а обменно-корреляционный потенциал около  $-0,7 Ry_{ex}$ . Для дырок внутри квантовой ямы отталкивающий кулоновский потенциал компенсируется обменно-корреляционным потенциалом. В выбранной нами модели эффективные потенциалы легких и тяжелых дырок отличаются только внутри квантовой ямы на величину  $\Delta_{hl}$ .

На рисунке 2.6 показана зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности пар для квантовой ямы с шириной  $d=2$  (10 нм). При  $x=0,03$  минимум энергии достигается при  $N=0,34$  и ЭДЖ является трехкомпонентной с плотностью легких дырок  $N_{hl}=0,12$ . При увеличении концентрации германия появляются два минимума, в первом из них (при меньшей плотности  $N$ ) ЭДЖ содержит только тяжелые дырки, во втором – легкие и тяжелые дырки. При  $x=0,034$  оба минимума энергии почти равны. При дальнейшем увеличении  $x$  остается один минимум энергии (двухкомпонентная ЭДЖ) и равновесная плотность электронно-дырочных пар 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. Отметим, что при  $x=0,03$  практически во всем диапазоне плотностей электронно-дырочных пар (рисунок 2.6) присутствуют легкие дырки. При  $x=0,034$  и  $x=0,04$  легкие дырки с низкой плотностью начинают появляться вблизи первого минимума энергии и при  $N=0,3$  плотности легких дырок достигают значений  $N_{hl}=0,087$  (при  $x=0,034$ ) и  $N_{hl}=0,071$  (при  $x=0,04$ ).

Переход от трехкомпонентной к двухкомпонентной ЭДЖ при увеличении  $x$  происходит достаточно резко. Это наглядно продемонстрировано на рисунке 2.7. Отметим, что при малых  $x$  плотности легких и тяжелых дырок близки друг к другу. При переходе от трехкомпонентной к двухкомпонентной ЭДЖ равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается более чем в два раза.

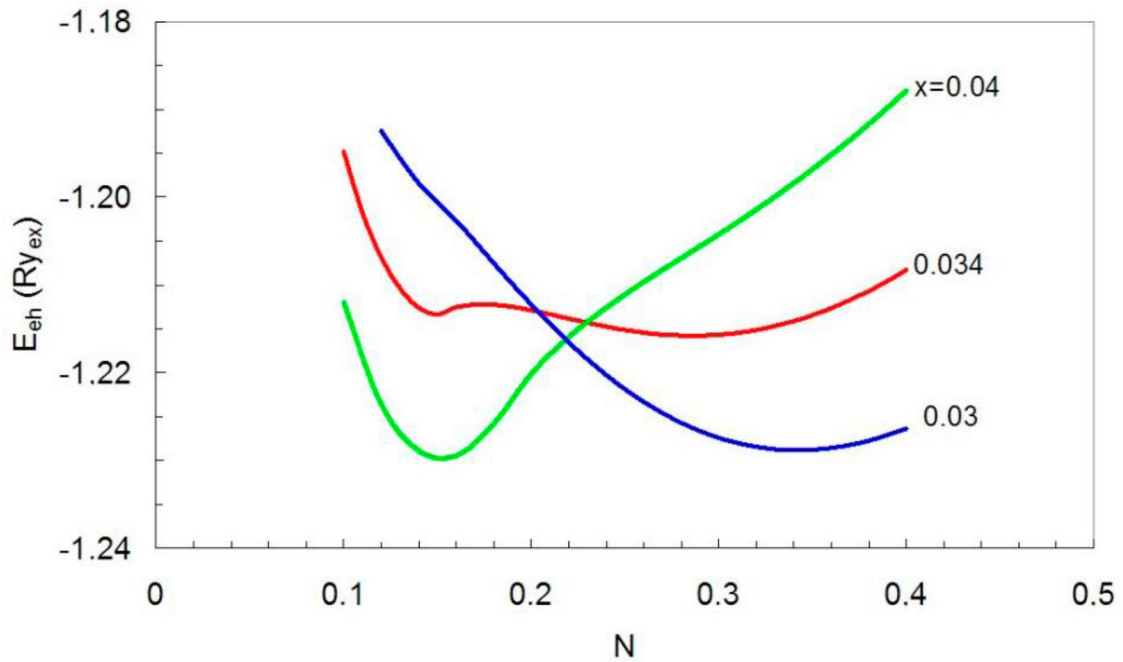


Рисунок 2.6 - Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности электронно-дырочных пар при  $d = 2$

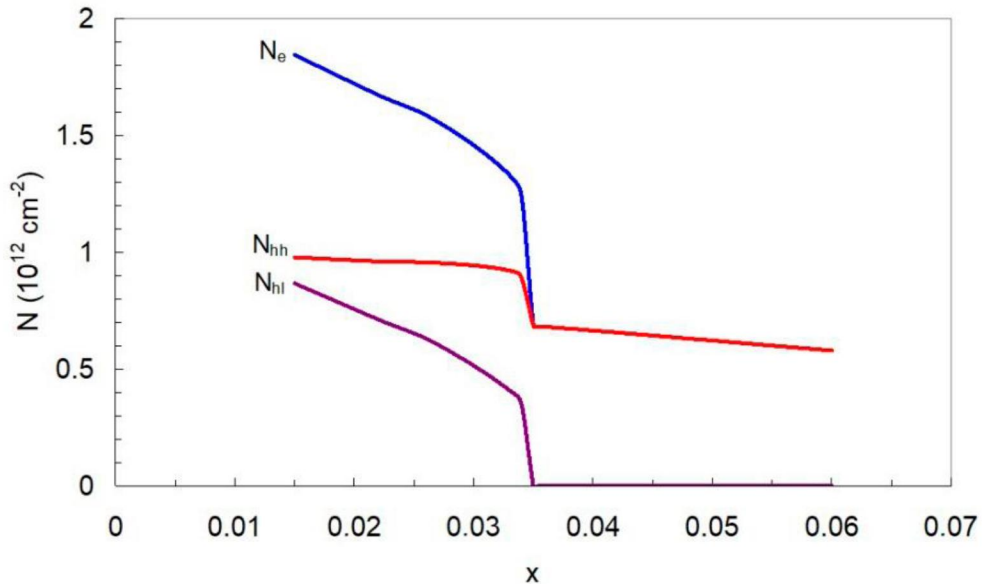


Рисунок 2.7 – Зависимости плотностей электронов, тяжелых и легких дырок от концентрации германия в слое SiGe при  $d=2$

Были проведены вычисления для структур с различными ширинами квантовых ям. Результаты вычислений приведены на рисунке 2.8. 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.

Учет в расчетах наличия в ЭДЖ легких и тяжелых дырок приводит к хорошему согласию с экспериментальными данными. Действительно в работе [33] 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  $N = 1,6 \times 10^{12}$  см<sup>-2</sup> [33] при  $d = 5$  нм хорошо согласуется с вычисленными значениями (рисунок 2.8). В работе [80] показано, что в структуре с  $d = 2$  нм и  $x = 0,09$  по-видимому образуется двухкомпонентная квазидвумерная ЭДЖ. Результаты вычислений для такой структуры (рисунок 2.8) дают  $N = 6 \times 10^{11}$  см<sup>-2</sup>, что неплохо согласуется с экспериментом [80].

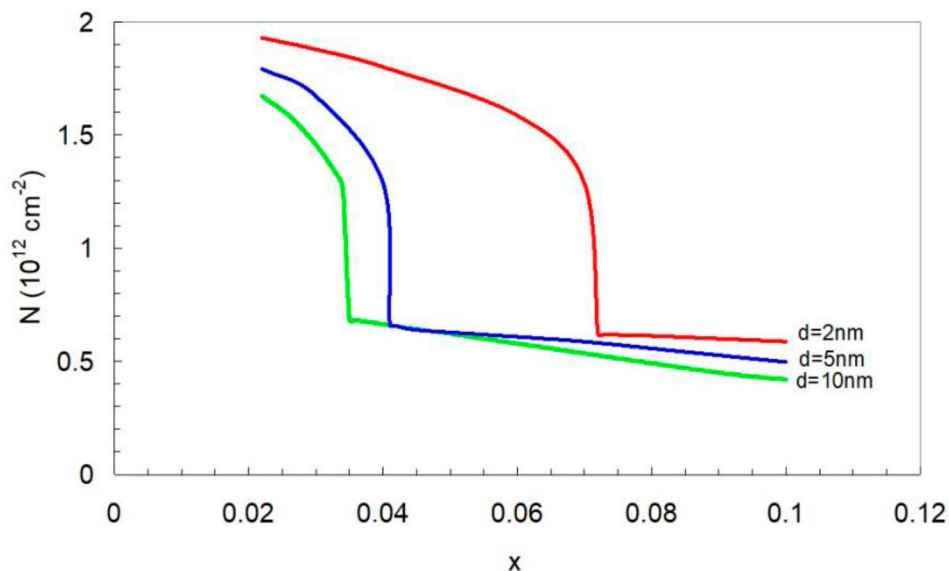


Рисунок 2.8 – Зависимость равновесной плотности электронно-дырочных пар от концентрации германия в слое SiGe

В слое SiGe из-за деформаций происходит расщепления дырочных состояний. Представляет интерес изучить влияние расщепления  $\Delta_{hh}$  на свойства ЭДЖ. Изменить расщепление валентной зоны можно приложением компенсирующего давления к гетероструктуре и в дальнейшем расщепление между тяжелыми и легкими дырками будем считать нулевым [82]. Вычисления проведем для структуры с  $d = 1$ .

Результаты численного решения уравнений Шредингера представлены на рисунке 2.9. Из-за влияния барьера волновая функция электронов имеет более протяженное состояние по сравнению с волновыми функциями дырок. Поэтому дырки создают притягивающий потенциал для электронов, который в центре барьера более чем в два раза больше высоты барьера. Отметим, что обменно-корреляционное взаимодействие также значительно уменьшает высоту барьера для электронов.

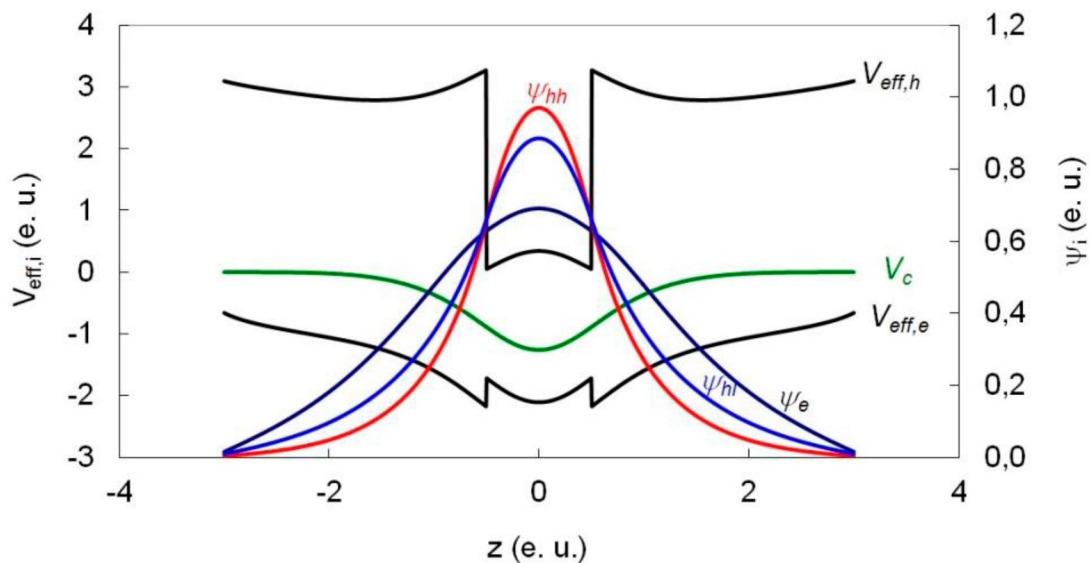


Рисунок 2.9 – Профили плотности волновых функций и потенциалов для электронов, легких и тяжелых дырок ( $N_e = 0,36$ ,  $x = 0,06$ )

На рисунке 2.10 приведена зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности пар для различных значений  $x$ . При  $x = 0,03$  равновесная плотность электронно-дырочных пар равна 0,42



( $1,7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ ), что очень близко к экспериментальному значению [14, 21, 26]. Отметим, что равновесная плотность увеличивается по сравнению со случаем  $d = 2$  (рисунок 2.10). С увеличением  $x$  равновесная плотность уменьшается и при  $x = 0,09$  достигает значения  $10^{12} \text{ см}^{-2}$ . В рассматриваемом диапазоне ЭДЖ содержит как тяжелые дырки, так и легкие.

Считаем, что при  $d > 1$  энергия связи экситона близка к энергии связи трехмерного экситона. Тогда из результатов, представленных на рисунке 2.10, видно, что энергия связи ЭДЖ всегда больше 5 мэВ. Рассчитанная энергия связи хорошо согласуется с экспериментальными результатами [34]. Отметим, что проведенные вычисления для ЭДЖ с одним типом дырок дают значительно меньшую равновесную плотность и энергию связи.

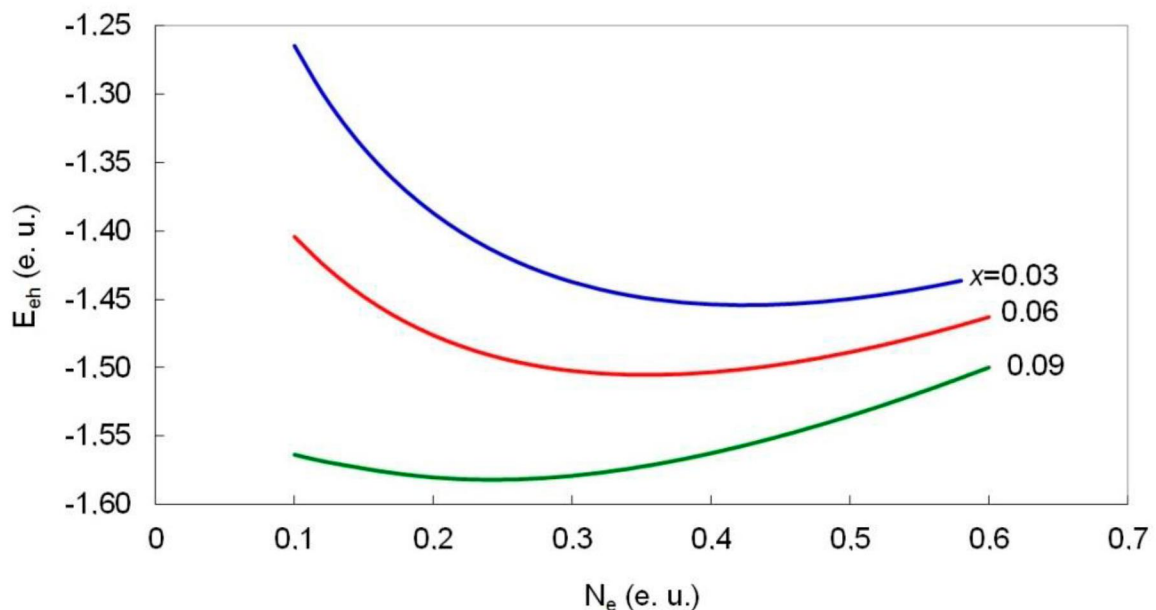


Рисунок 2.10 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности электронно-дырочных пар

При  $x > 0,1$  в ЭДЖ существуют только тяжелые дырки (рисунок 2.11). Это связано с тем, что с увеличением глубины ямы растет разница между уровнями энергии легких и тяжелых дырок, а также увеличивается

потенциальная энергия легких дырок вне квантовой ямы. ЭДЖ с тяжелыми дырками имеет значительно меньшую равновесную плотность, чем ЭДЖ с двумя типами дырок. Уменьшение равновесной плотности с ростом  $x$  в основном связано с влиянием продольной кинетической энергии, которая в слое SiGe у легких дырок меньше.

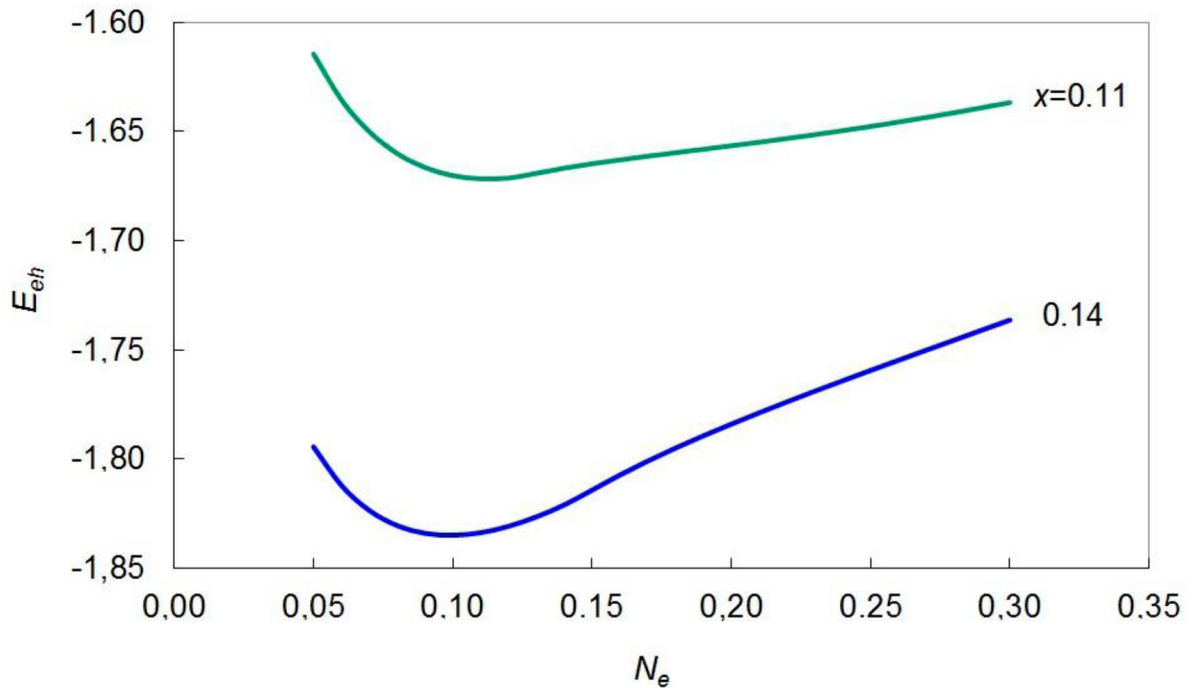


Рисунок 2.11 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности электронно-дырочных пар

На рисунке 2.12 приведена зависимость двумерных плотностей носителей заряда от содержания германия в слое SiGe. Видно, что при малых  $x$  плотности легких и тяжелых дырок близки и при  $x > 0,1$  ЭДЖ содержит только тяжелые дырки. Отметим, что в структурах с учетом расщепления дырочных состояний подобный переход происходит при значительно меньшем значении  $x$  (рисунок 2.7). Таким образом, получено, что диапазон стабильности трехкомпонентной ЭДЖ по параметру  $x$  увеличивается с уменьшением расщепления и ширины квантовой ямы.

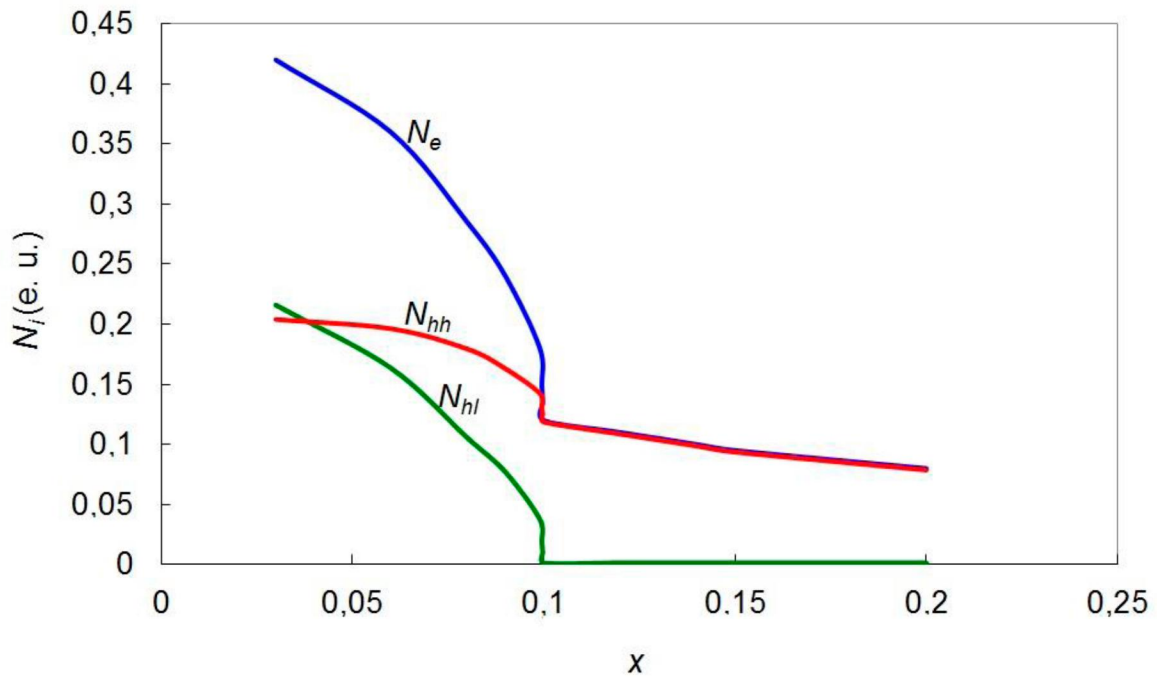


Рисунок 2.12 – Зависимость двумерных плотностей носителей заряда от  $x$

### 2.3 Электронно-дырочная жидкость в Si/SiO<sub>2</sub> квантовых ямах

В работах [26, 27] экспериментально исследовано рекомбинационное излучение неравновесных электронно-дырочных пар в квантовых ямах SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub>. В этих работах впервые показана возможность образования квазидвумерной ЭДЖ и подробно исследованы ее свойства в зависимости от ширины квантовой ямы.

Работы в данной области в основном ведутся с целью создания новых светоизлучающих устройств. Несомненный интерес также представляет проверка теоретических методов для подобных систем с сильным межчастичным взаимодействием. Одним из таких методов является теория функционала плотности. Эта теория хорошо себя зарекомендовала в изучении свойств трехмерной ЭДЖ.

Как и в предыдущих разделах используем теорию функционала плотности для вычисления энергии ЭДЖ и нахождения равновесной плотности электронно-дырочных пар в квантовой яме SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub> [83].

Для вычисления энергии квазидвумерной ЭДЖ решается система уравнений Кона-Шэма (2.2) – (2.9). Проведены вычисления для двух поверхностей кремния. Для вычислений мы использовали следующие параметры [26, 27]:  $g_e = 2$ ,  $m_{z,e} = 0,918m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,19m_0$ ,  $m_{z,h} = 0,53m_0$ ,  $m_{d,h} = 0,53m_0$  для поверхности (100);  $g_e = 6$ ,  $m_{z,e} = 0,258m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,358m_0$ ,  $m_{z,h} = 0,53m_0$ ,  $m_{d,h} = 0,53$  ( $m_0$  – масса свободного электрона) для поверхности (111). В структуре  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  глубины ям составляют 3,2 эВ и 5 эВ соответственно для электронов и дырок [27].

На рисунке 2.13 приведены результаты вычислений для поверхности кремния (100) при равновесной плотности электронно-дырочных пар  $N=0,43$  и ширинах ям  $d = 1$ . Глубина ям для носителей заряда на много больше нижних уровней энергии, поэтому волновые функции электронов и дырок совпадают и на рисунке 2.13 они не различимы. Отметим, что дно квантовых ям за счет обменно-корреляционного взаимодействия уменьшается на величину порядка  $Ry_{ex}$ . В целом ЭДЖ имеет локальную электронейтральность, поэтому потенциал изображения, вызванным сильным отличием диэлектрических проницаемостей кремния и окисла кремния, можно пренебречь. Во внешнем электрическом поле нейтральность ЭДЖ нарушается, и силы изображения будут сильно влиять на свойства ЭДЖ [27].

На рисунке 2.14 приведена зависимость энергии электронно-дырочной пары  $E_{eh}$  от двумерной плотности пар  $N$  для поверхности кремния (100) при различных значениях ширины ям  $d$ . Видно, что с увеличением  $d$  равновесная плотность и энергия уменьшаются. При  $d > a_{ex}$  энергия связи экситона близка к энергии связи трехмерного экситона. Из результатов, представленных на рисунке 2.14, видно, что энергия связи ЭДЖ по отношению к распаду на экситоны больше или порядка  $Ry_{ex}$ , что значительно превышает энергию связи трехмерной ЭДЖ. С увеличением ширины квантовой ямы, энергия связи уменьшается. Отметим, что

трехмерные плотности носителей заряда  $n \approx N/d$  близки к значению равновесной плотности в трехмерной жидкости.

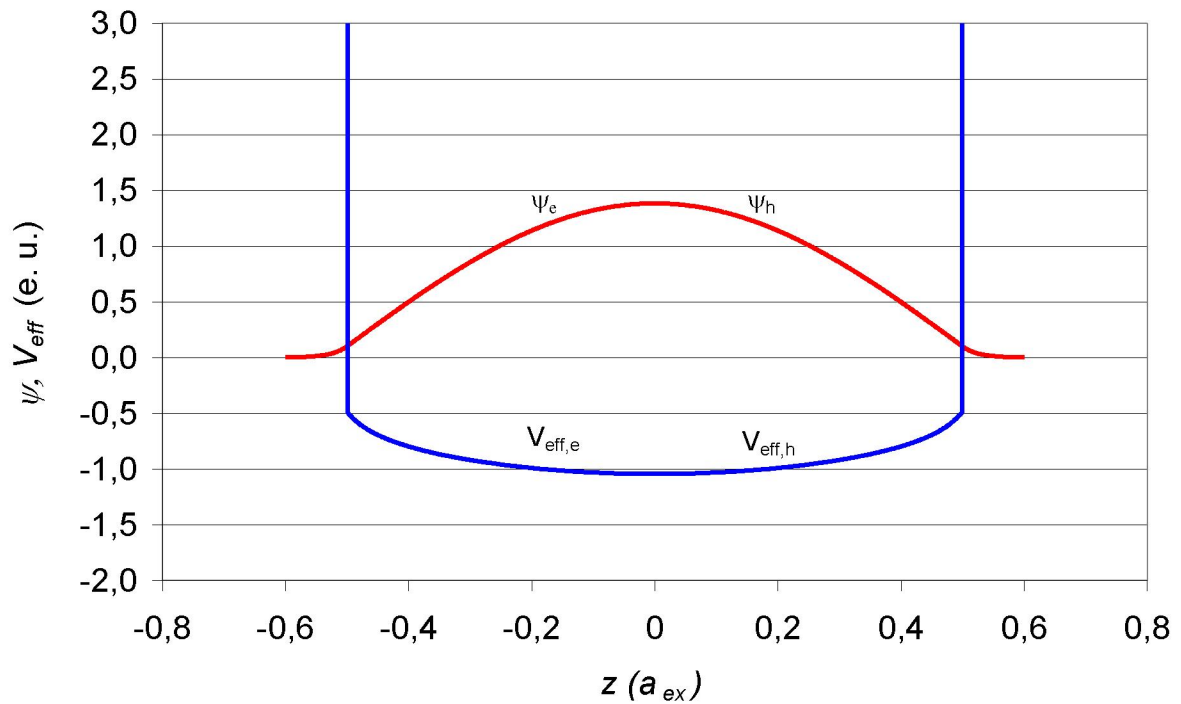


Рисунок 2.13 - Профили эффективных потенциалов и волновых функций в квантовых ямах шириной  $d=1$  и  $N=0,43$

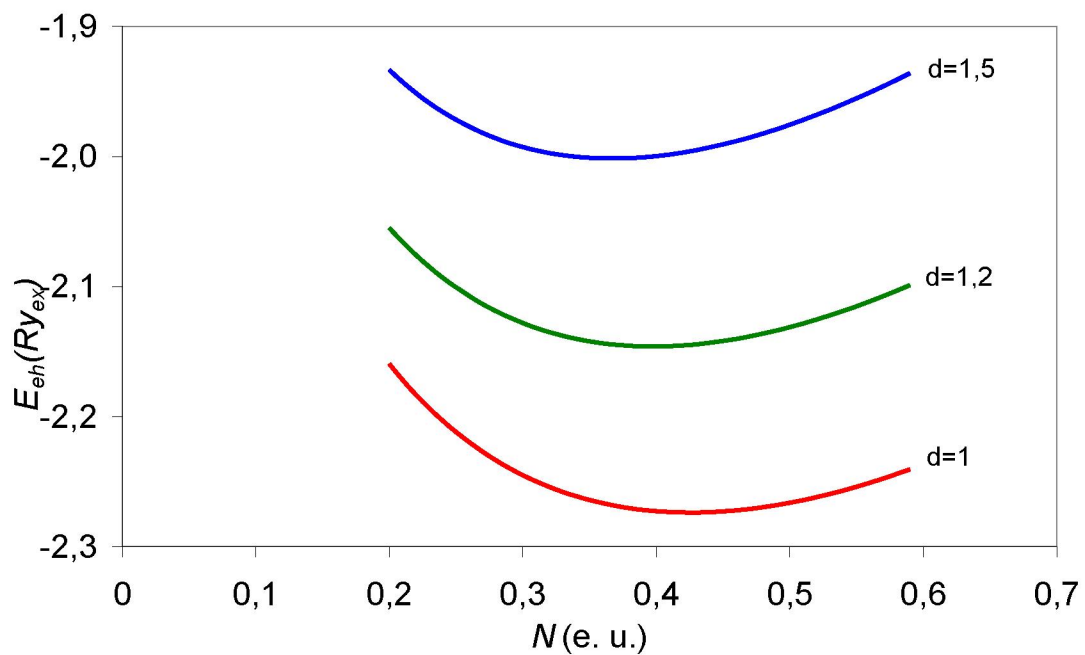


Рисунок 2.14 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности электронно-дырочных пар

На рисунке 2.15 приведена расчетная (сплошная линия) и экспериментальная [27] (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.

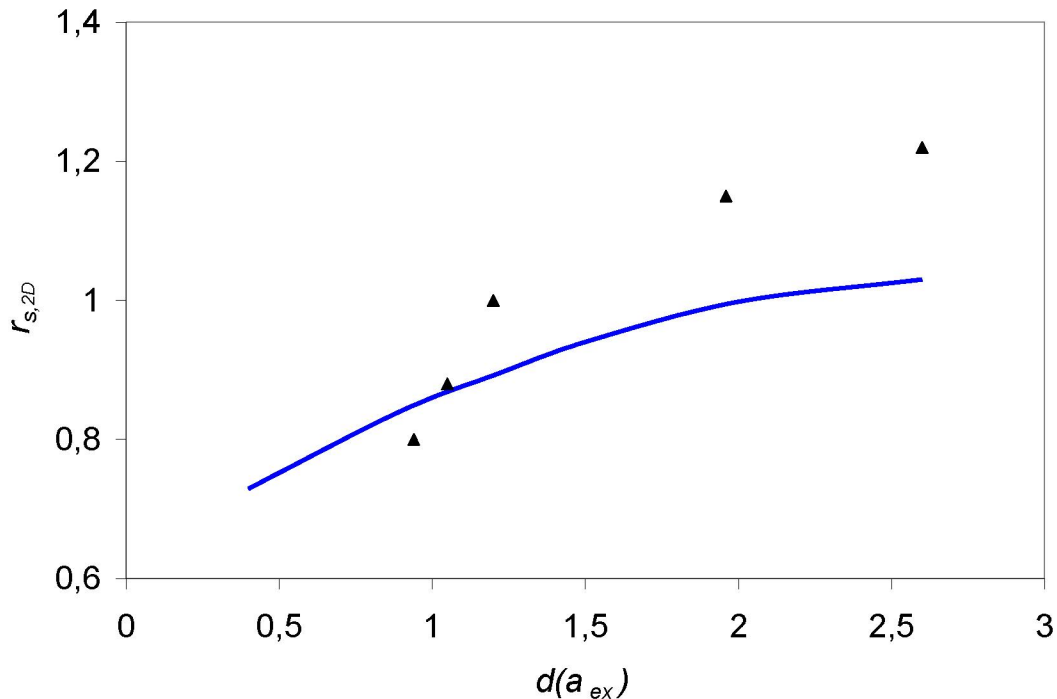


Рисунок 2.15 – Зависимость параметра  $r_{s,2D}$  от ширины ямы. Сплошная линия – численный расчет, треугольники – эксперимент [27]

Хорошо известно, что наличие вырожденности зоны проводимости приводит к увеличению равновесной плотности и энергии связи трехмерной ЭДЖ. Аналогичное явление наблюдается и в квазидвумерной ЭДЖ. Результаты расчетов для поверхности кремния (111) (рисунок 2.16) показали, что энергия связи увеличивается примерно в 1,4 раза, а равновесная плотность увеличивается более чем в два раза по сравнению с плотностью для поверхности кремния (100). Увеличение энергии связи и равновесной плотности в основном связано с уменьшением продольной

кинетической энергии электронов. Для поверхности кремния (111) равновесная плотность электронно-дырочных пар  $N_{eq} = 410^{12} \text{ см}^{-2}$  при  $d=1$  и равновесная плотность уменьшается с увеличением ширины квантовой ямы. Отметим также, что трехмерные плотности носителей заряда значительно больше плотностей в трехмерной ЭДЖ.

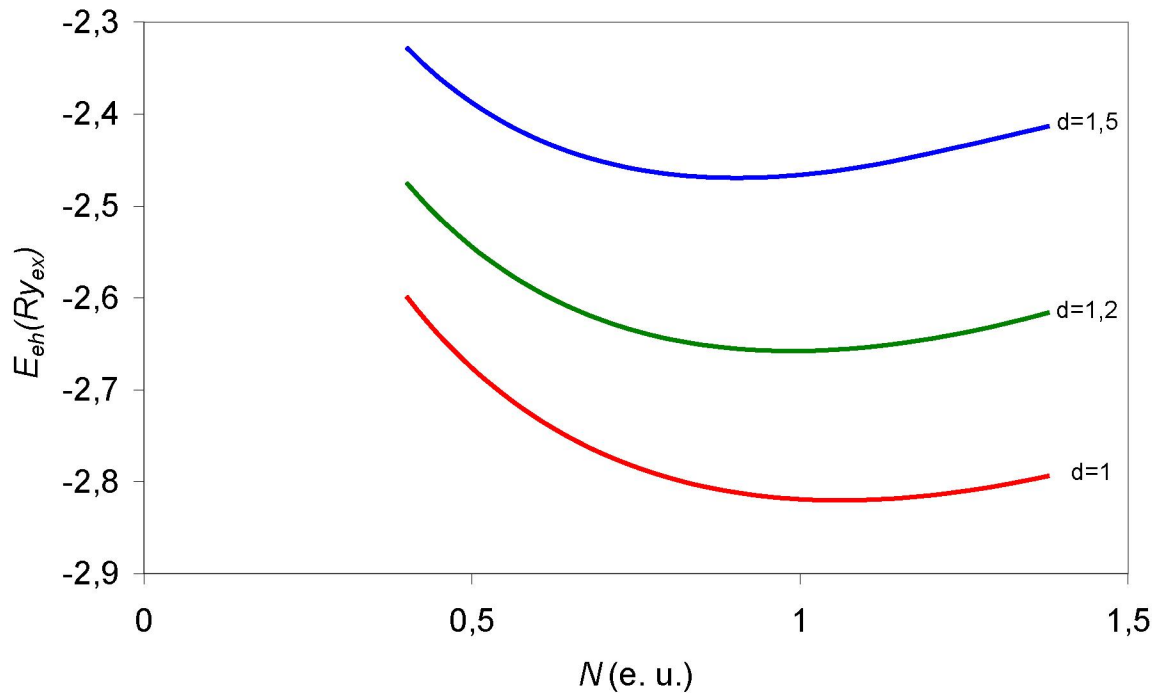


Рисунок 2.16 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от двумерной плотности электронно-дырочных пар

В разделе 1.1 получено аналитическое выражение для энергии квазидвумерной ЭДЖ. Сравнение результатов, полученных в настоящем разделе с аналитическими результатами при  $d=1$  для поверхностей кремния (100) и (111) показало, что различие в равновесной плотности незначительное (несколько процентов), тогда как энергия отличается примерно в 1,5 раза. Отличие энергии в основном связано с тем, что в данном разделе энергия отсчитывается от уровней энергии электронов и дырок в пустой яме.

## 2.4 Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в электрическом поле

Впервые в работах [24, 25] показана возможность образования квазидвумерной ЭДЖ в кремниевых МОП структурах в электрическом поле. Эти исследования демонстрируют возможность образования квазидвумерной ЭДЖ, состоящей из двух слоев (первый слой с поверхностной плотностью  $N_1$ , второй – с поверхностной плотностью  $N_2$ ,  $N_t = N_1 - N_2$  – поверхностная плотность заряда).

В настоящем разделе мы используем теорию функционала плотности для вычисления энергии квазидвумерной ЭДЖ во внешнем электрическом поле. Метод решения задачи аналогичен методу, предложенному в работе [83] для ЭДЖ в нулевом электрическом поле. В этой работе проведены вычисления для квантовых ям различной ширины и получено удовлетворительное согласие вычисленных значений равновесной плотности с экспериментальными результатами [27] для поверхности кремния (100).

Рассмотрим ЭДЖ в квантовой яме  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$  во внешнем электрическом поле, направленном перпендикулярно электронно-дырочному слою [93]. Электрическое поле может создаваться затвором, расположенным за слоем  $\text{SiO}_2$ . Введем в качестве параметра двумерную плотность заряда затвора  $N_t$ . Тогда для электронейтральной системы запишем:  $N_e = N_t + N_h$ , где  $N_e$  и  $N_h$  – двумерные плотности электронов и дырок. В случае  $N_t > 0$  мы получаем систему электронно-дырочных пар с плотностью  $N_{eh} = N_h$  связанных с электронным слоем с плотностью  $N_t$ . В противоположном случае  $N_t < 0$  получается система электронно-дырочных пар с плотностью  $N_{eh} = N_e$  связанных с дырочным слоем с плотностью  $N_t$ .

Для вычисления энергии и равновесной плотности ЭДЖ используем модель раздела 2.3. Уравнения Кона-Шэма имеют такой же вид, как и в разделе 2.3 за исключением электростатического потенциала:



$$V_c(z) = 8\pi N_t z + 8\pi \int_{-\infty}^z (z - z') [n_h(z') - n_e(z')] dz'. \quad (2.33)$$

Выражение (2.33) отличается первым слагаемым, которое учитывает внешнее электрическое поле с напряженностью  $8\pi N_t$ .

Вычисления проводились для квантовой ямы  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ . Для вычислений используем следующие параметры [27]: число электронных долин  $g_e = 2$ , масса плотности состояний электронов  $m_{d,e} = 0,19m_0$ ,  $m_{z,e} = 0,918m_0$ ,  $m_h = 0,53m_0$  для (100) Si;  $g_e = 6$ ,  $m_{z,e} = 0,258m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,358m_0$ ,  $m_h = 0,53m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона) для (111) Si;  $U_e = 246$ ,  $U_h = 384$ .

Нелинейные уравнения Кона-Шэма для электронов и дырок решались численно. На рисунке 2.17 и рисунке 2.18 показаны профили плотностей электронов и дырок для основного состояния ЭДЖ при различных значениях внешнего электрического поля. При отрицательных значениях  $N_t$  внешнее электрическое поле экранируется дырками и профиль плотности дырок смещается в сторону отрицательных значений  $z$ . Как видно из рисунка 2.17, такое смещение для квантовой ямы с шириной  $d = 1$

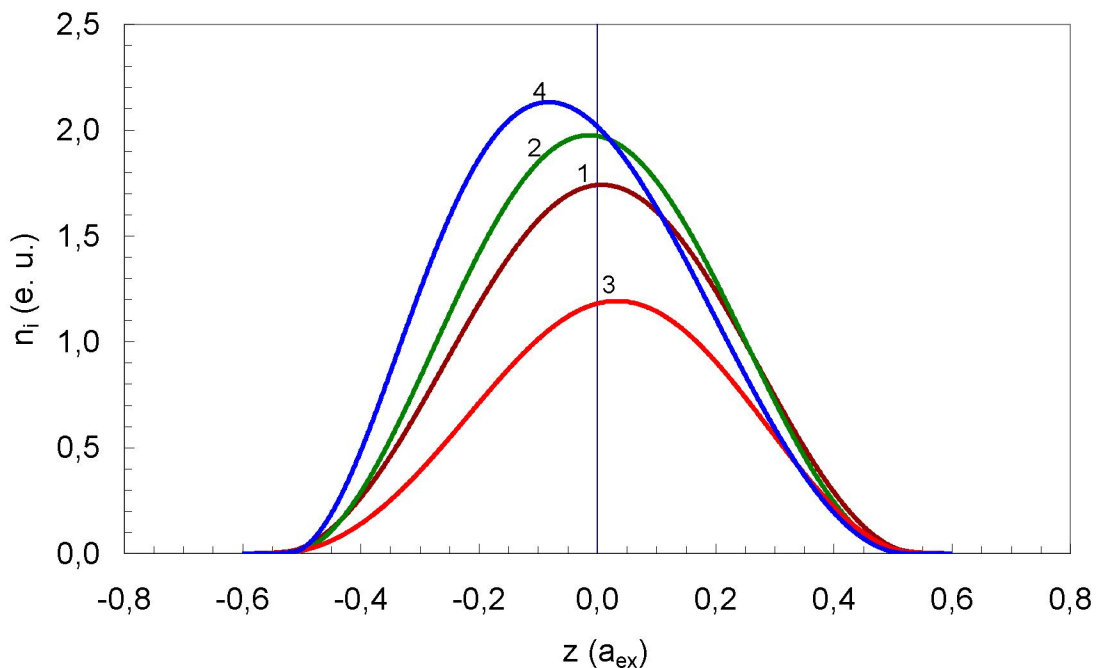


Рисунок 2.17 – Профили плотностей электронов (1, 3) и дырок (2, 4) для  $N_t = -0,1$  (1,2) и  $N_t = -0,5$  (3,4).  $d = 1$ , (111) Si

достаточно слабое. Например, при  $N_t = -0,5$  максимум плотности достигается при  $z = -0,08$  для дырок и  $z = 0,03$  для электронов.

При ширине квантовой ямы  $d = 2$  (рисунок 2.18) влияние внешнего электрического поля значительно сильнее, чем для квантовой ямы с шириной  $d = 1$ . Видно, что перекрытия электронных и дырочных плотностей уменьшается с ростом напряженности электрического поля. Такое расслоение ЭДЖ приводит к росту кулоновской энергии и уменьшению равновесной плотности электронно-дырочных пар.

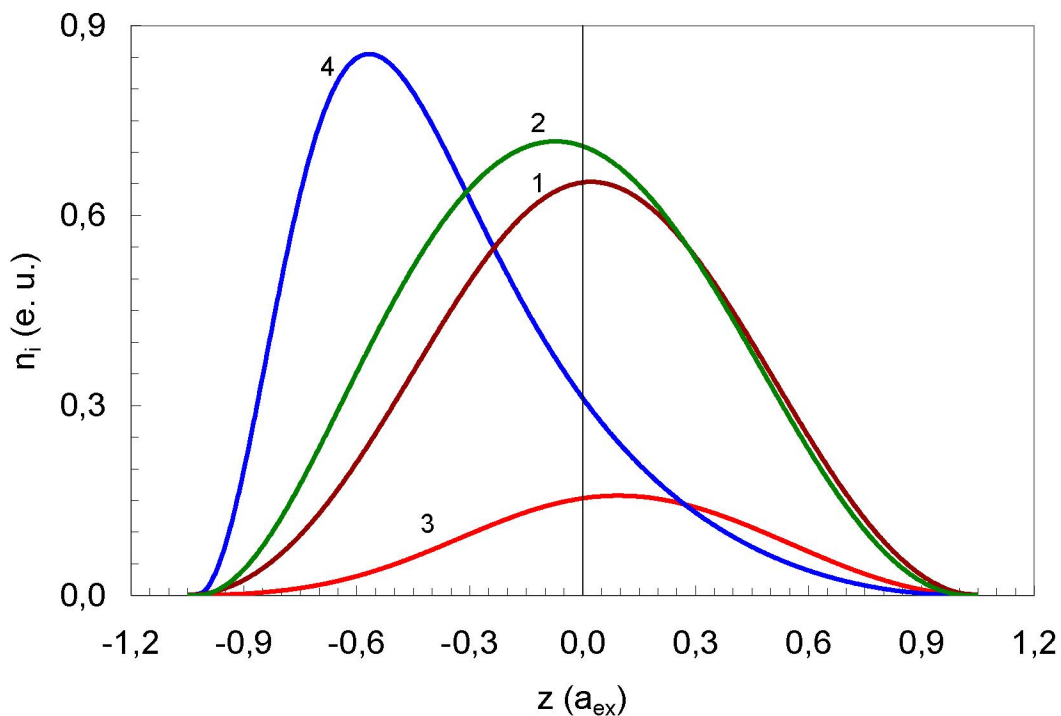


Рисунок 2.18 – Профили плотностей электронов (кривые 1, 3) и дырок (кривые 2, 4) для  $N_t = -0,1$  (кривые 1, 2) и  $N_t = -0,5$  (кривые 3, 4).  $d = 2$ , (111) Si

Уменьшение равновесной плотности ЭДЖ во внешнем электрическом поле наглядно продемонстрировано на рисунке 2.19. Видно, что зависимость  $N_{eh}(N_t)$  имеет почти симметричный вид, несмотря на различие эффективных масс электронов и дырок. Эта симметрия объясняется тем, что основной вклад в изменение энергии в электрическом поле дают кулоновская и обменно-корреляционная энергии. При  $d = 2$  и  $N_t = -0,4$

(или  $N_t = 0,4$ ) равновесная плотность электронно-дырочных пар  $N_{eh} \approx 0,1$ . Такая плотность соответствует параметру  $r_s = 1/(\pi N_{eh})^{1/2} \approx 1,8$  и при таких плотностях образуется электронно-дырочная плазма. При  $d = 1$  в рассматриваемом диапазоне  $N_t$  (рисунок 2.19) параметр  $r_s$  всегда меньше единицы и основным состоянием является ЭДЖ. Таким образом, в широкой квантовой яме ЭДЖ разрушается при меньшем значении электрического поля по сравнению с узкой квантовой ямой.

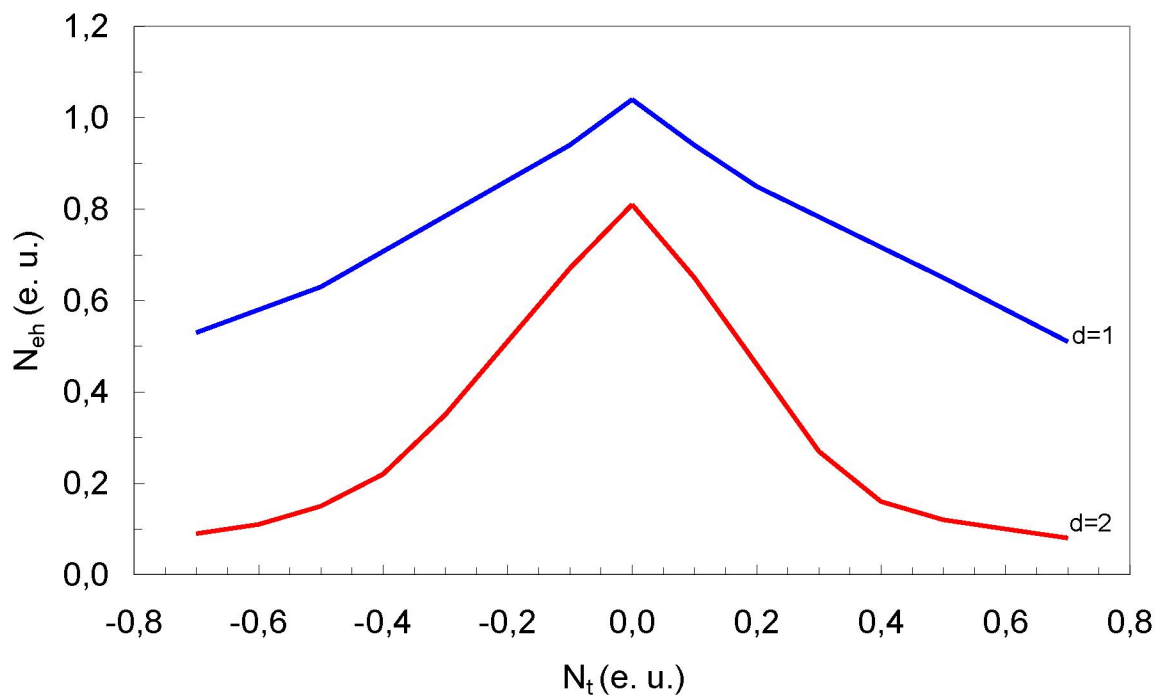


Рисунок 2.19 – Зависимости равновесной плотности электронно-дырочных пар от плотности заряда затвора для (111) Si

Аналогичные вычисления также проведены для (100) Si. Для этой поверхности кремния равновесная плотность ЭДЖ в нулевом электрическом поле значительно меньше, чем для (111) Si. На рисунке 2.20 приведены зависимости равновесной плотности электронно-дырочных пар от плотности заряда затвора для (100) Si. Вид зависимости  $N_{eh}(N_t)$  такой же, как и для (111) Si. Видно, что в случае  $d = 2$  равновесная плотность уменьшается сильнее при увеличении напряженности электрического поля по сравнению со случаем  $d = 1$ . Для (100) Si при  $d = 2$  переход к электронно-

дырочной плазме происходит в меньших электрических полях, чем для (111) Si. Следует отметить, что теоретическая модель использует условие локальной нейтральности ЭДЖ. Расслоение ЭДЖ в электрическом поле будет уменьшать обменно-корреляционную энергию и переход к электронно-дырочной плазме должен происходить в еще меньших электрических полях.

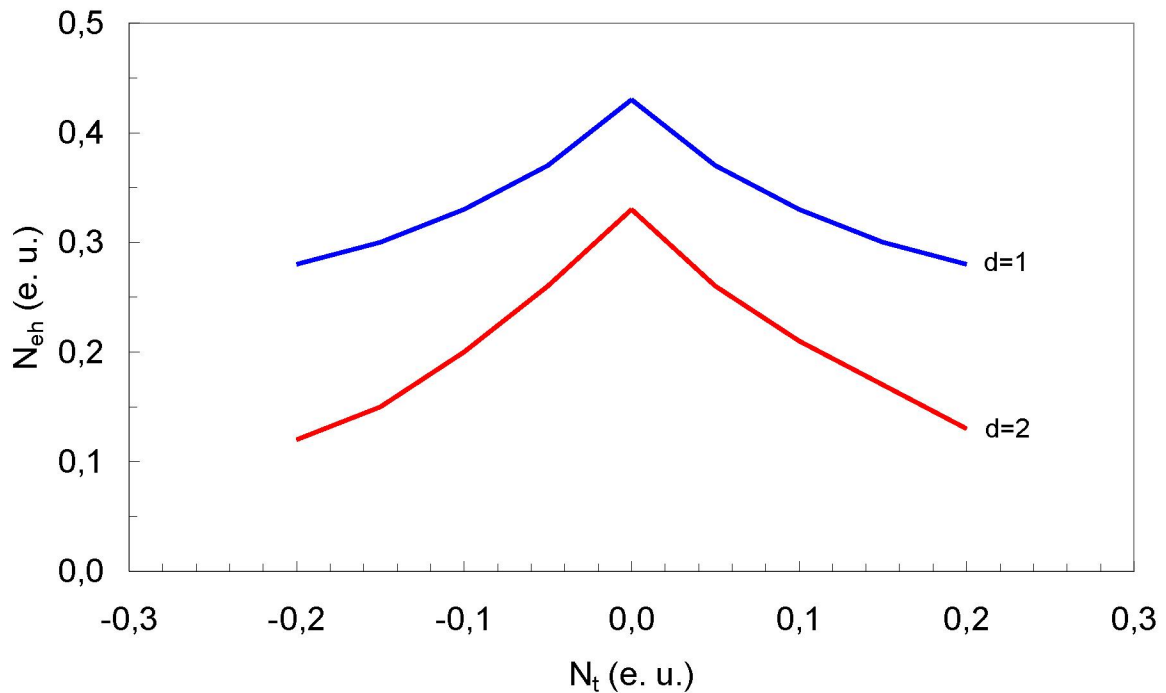


Рисунок 2.20 – Зависимости равновесной плотности электронно-дырочных пар от плотности заряда затвора для (100) Si

## 2.5 Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в магнитном поле

Электронная дырочная жидкость в полупроводниках представляет собой уникальную систему для изучения макроскопического квантового состояния. Свойства и поведение трехмерной ЭДЖ в магнитном поле достаточно хорошо изучены [69]. Трехмерная ЭДЖ в магнитном поле экспериментально исследовалась в работах [87-91]. В этих работах показано, что равновесная плотность электронно-дырочных пар сильно увеличивается с возрастанием напряженности магнитного поля. Например,

в антимонде индия [91] равновесная концентрация электронно-дырочных пар увеличивалась более чем в два раза при изменении магнитного поля от 2,5 Т до 5,5 Т. Эти экспериментальные значения концентрации хорошо согласуются с результатами расчетов [91, 92]. Отметим, что в InAs [91], AlGaAs [89] и сильно деформированном германии [90] ЭДЖ образуется только в магнитном поле.

Менее изучены свойства ЭДЖ в низко-размерных полупроводниковых структурах. Недавно в работе [33] показана возможность образования трехкомпонентной ЭДЖ в структурах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si. Трехкомпонентная ЭДЖ содержит как тяжелые, так и легкие дырки и при увеличении содержания германия в квантовой яме происходит переход к двухкомпонентной ЭДЖ с тяжелыми дырками. В работе [75] получено аналитическое выражение для энергии квазидвумерной ЭДЖ при учете двух типов дырок. Результаты вычислений по предложенной нами модели расчета [75] свойств квазидвумерной ЭДЖ в SiGe квантовых ямах достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными [33]. В настоящем разделе эта модель обобщается для ЭДЖ в перпендикулярном 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:

$$E_k = E_0 + (k + 1/2)\hbar\omega_c, \quad (2.34)$$

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

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

$$N_{0,i} = 2g_i eB/h, \quad (2.35)$$

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

В экситонной системе единиц циклотронная энергия имеет вид:

$$E_{c,i} = \frac{\mu}{m_{d,i}} \frac{2}{L^2}, \quad (2.36)$$

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:

$$E_{c,i} = \frac{\mu}{m_{d,i}} \frac{1}{L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,i}} (2k+1) N_{i,k}, \quad (2.37)$$

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  $k < k_{m,i}$ ,  $N_{i,k_m} = N_i - k_{m,i} N_{0,i}$ .

Считаем, что магнитное поле влияет только на продольное движение носителей заряда. Тогда для вычисления энергии электронно-дырочных пар можно использовать результаты работы [75], заменив продольную кинетическую энергию носителей заряда на энергию носителей заряда в магнитном поле (2.37). Таким образом, энергия на одну электронно-дырочную пару запишется в виде [94]:

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

$$\frac{\mu}{m_{d,e}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,e}} (2k+1) N_{e,k} + \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,hh}} (2k+1) N_{hh,k} + \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{1}{N_e L^2} \sum_{k=0}^{k_{m,hl}} (2k+1) N_{hl,k}, \quad (2.38)$$

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

В выражении (2.38) первые три слагаемых взяты из работы [75] и каждое из них соответствует сумме поперечной кинетической и обменной энергии электронов, тяжелых и легких дырок, соответственно.

Для нахождения плотностей легких и тяжелых дырок используем условие:

$$E_{hh} + \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{2}{L^2} \left( \nu_{hh} + \frac{1}{2} \right) = E_{hl} + \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{2}{L^2} \left( \nu_{hl} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.39)$$

где  $\nu_i = N_i \pi L^2$  – фактор заполнения уровня Ландау для дырок,  $E_i$  – уровень энергии поперечного квантования.

Для электронейтральной ЭДЖ  $N_e = N_{hh} + N_{hl} = N$  из выражения (2.39) получаем

$$N_{hl} = N_e \frac{m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} - \frac{m_{d,hh} m_{d,hl}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}} \frac{E_{hl} - E_{hh}}{2\pi\mu} + \frac{1}{2\pi L^2} \frac{m_{d,hl} - m_{d,hh}}{m_{d,hh} + m_{d,hl}}. \quad (2.40)$$

Если из выражения (2.40) получается  $N_{hl} < 0$ , тогда необходимо брать  $N_{hh} = N_e$  и  $N_{hl} = 0$ . Отметим, что первые два слагаемых в выражении (2.40) совпадают для случая нулевого магнитного поля [75], а последнее слагаемое связано с отличием циклотронной энергии легких и тяжелых дырок.

Вычисления проводились для структуры Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si. Как и в работе [75] мы использовали следующие параметры:  $g_e = 4$ ,  $g_{hh} = g_{hl} = 1$ ,  $m_{z,e} = 0,198m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,44m_0$ ,  $m_{z,hh} = 0,28m_0$ ,  $m_{d,hh} = 0,2m_0$ ,  $m_{z,hl} = 0,18m_0$ ,  $m_{d,hl} = 0,25m_0$  ( $m_0$  – масса свободного электрона). В разности энергий  $E_{hl} - E_{hh}$  мы взяли величину расщепления между легкими и тяжелыми дырками  $\Delta_{hl} = 16,6x$ .

Результаты расчетов по формуле (2.38) показали, что в магнитном поле  $B < 1$  Тл зависимость энергии электронно-дырочной пары от плотности носителей имеет такой же вид как и в работе [75] 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 2.21 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.

В разделе 1.1 показано, что в SiGe квантовых ямах при концентрации германия  $x > 0,08$  образуется ЭДЖ с электронами и тяжелыми дырками. Магнитное поле может стабилизировать ЭДЖ с тремя типами носителей заряда при значениях  $x > 0,08$ . Из результатов, представленных на рисунке 2.21, 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 и тяжелыми дырками. При  $B > 10,3$  в основном состоянии ЭДЖ состоит из электронов, легких и тяжелых дырок, причем плотность электронно-дырочных пар

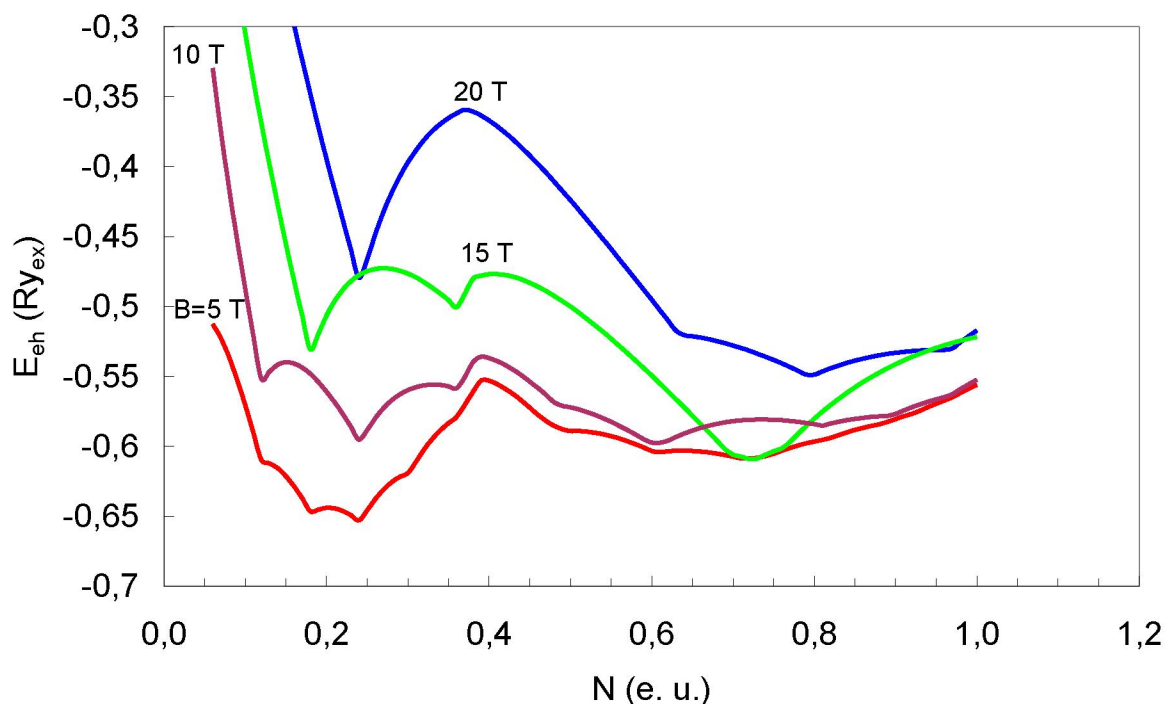


Рисунок 2.21 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар при  $x = 0,1$



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.

На рисунке 2.22 приведена зависимость плотностей носителей заряда от магнитного поля. Видно, что при низких магнитных полях ЭДЖ состоит из электронов и тяжелых дырок, а с увеличением магнитного поля появляются легкие дырки, плотность которых всегда меньше плотности тяжелых дырок. Кроме возникновения перехода от двухкомпонентной к трехкомпонентной ЭДЖ, следует отметить резкий рост равновесной плотности электронно-дырочных пар при увеличении магнитного поля. Плотности носителей заряда изменяются линейно в зависимости от магнитного поля. Это явление наглядно продемонстрировано на рисунке 2.23. Зависимости факторов заполнения уровней Ландау от магнитного поля имеют форму плато. При низких магнитных полях в интервале от 3,5 до 5,9 Тл основным состоянием является состояние с полностью заполненными уровнями Ландау электронов ( $\nu_e = N_e \pi L^2 / g_e = 1$ ) и дырок ( $\nu_{hh} = 4$ ). Отличие факторов заполнения электронов и дырок связано с тем, что в данной модели не учитывается долинное расщепление уровня энергии электронов. При увеличении магнитного поля энергетически выгодным становится состояние с полностью заполненным уровнем энергии дырок и частично заполненным уровнем энергии электронов. Как отмечалось выше, основным состоянием при  $x = 0,1$  и  $B > 10,3$  является трехкомпонентная ЭДЖ и в интервале магнитного поля от 10,3 до 12,5 Т (рисунок 2.23) для легких дырок уровень Ландау оказывается полностью заполненным. При дальнейшем увеличении магнитного поля полностью

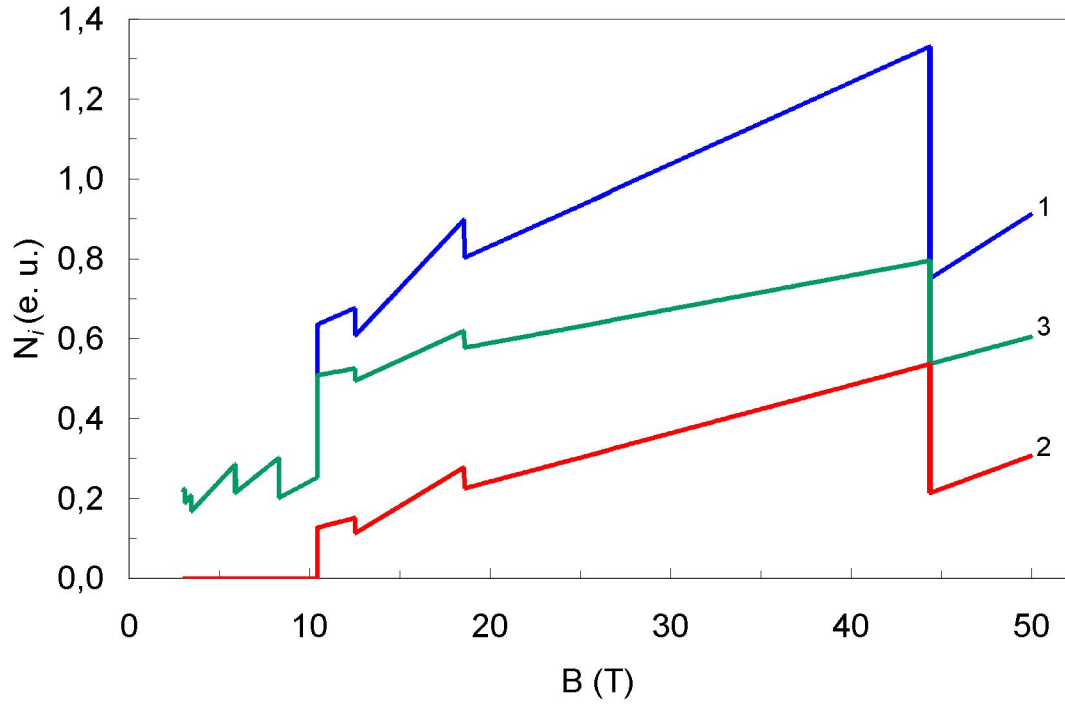


Рисунок 2.22 – Зависимость плотностей электронов (1), легких (2) и тяжелых (3) дырок от магнитного поля при  $x=0,1$

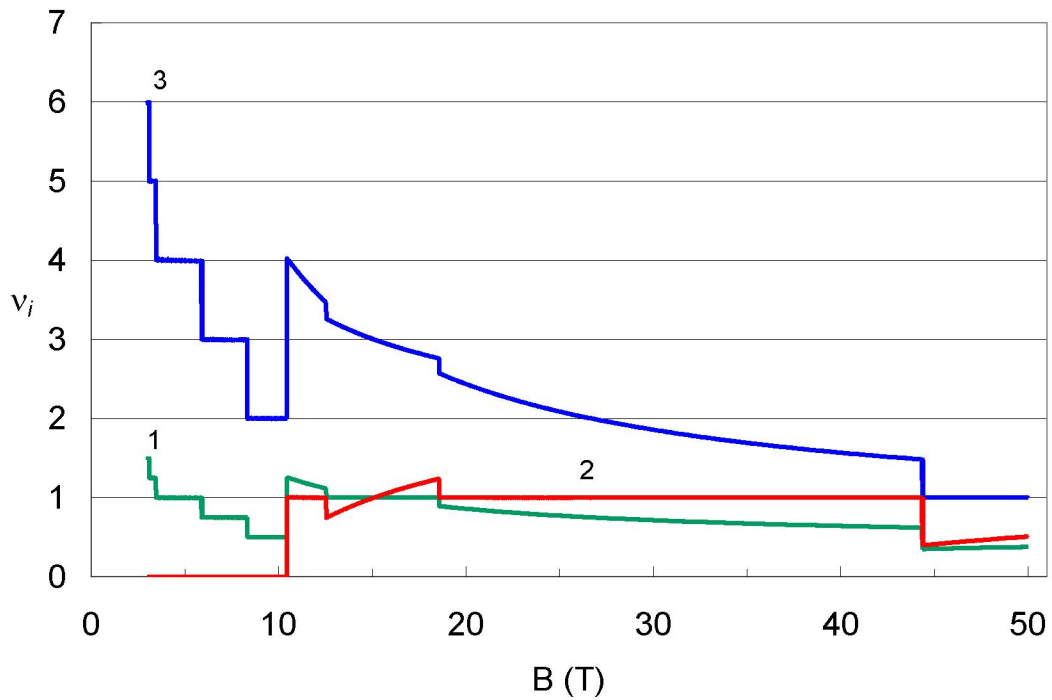


Рисунок 2.23 – Зависимости факторов заполнения уровней Ландау электронов (1), легких (2) и тяжелых (3) дырок от магнитного поля при  $x=0,1$

заполнен уровень Ландау для электронов, а затем опять полностью заполняется уровень легких дырок. При магнитном поле вблизи 50 Т в основном состоянии будет полностью заполнен уровень Ландау тяжелых дырок. Такое чередование полного заполнения уровней Ландау для легких и тяжелых дырок связано с близкими друг к другу продольными массами легких и тяжелых дырок.

На рисунке 2.24 приведена зависимость 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.

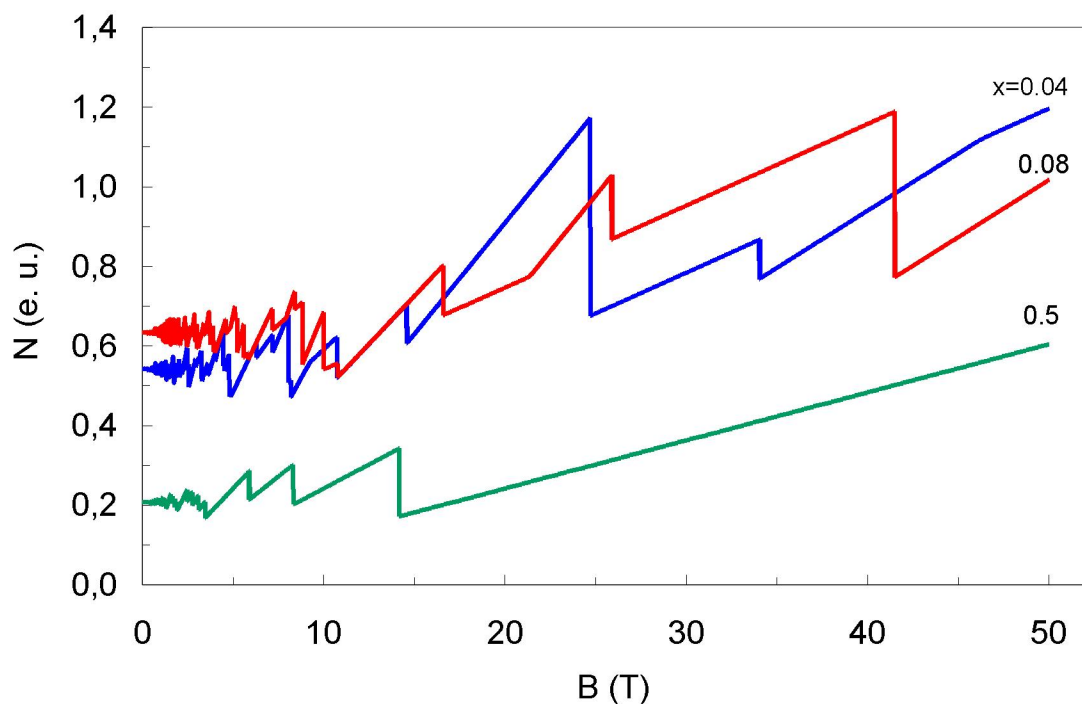


Рисунок 2.24 – Зависимость плотности электронно-дырочных пар от магнитного поля

Резкие скачки в плотности соответствуют переходу к новому 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  $\nu_{hh} = 1$ . 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.

## **2.6 Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в пленках алмаза**

Конденсация экситонов в ЭЖД активно изучается с конца 1960-х годов. ЭДЖ наблюдалась в Si, Ge, CdS, C, SiC и многих других полупроводниках. ЭДЖ является хорошим объектом для проверки различных теоретических моделей, учитывающих межчастичное взаимодействие. Вычисления [95] показывают, что ЭДЖ должна быть стабильна в алмазе. Впервые ЭДЖ в кристаллах алмаза экспериментально изучалась в работе [96]. Эксперименты [96-106] и вычисления [95] показывают, что в кристаллах алмаза образуется ЭДЖ с плотностью электронно-дырочных пар  $10^{20} \text{ см}^{-3}$  и высокой критической температурой, около 170 К. Такие высокие параметры связаны с низкой диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 5,7$  и с наличием шести долин для электронов и тремя типами дырок. Отметим, что в большинстве полупроводников критическая температура составляет несколько десятков градусов Кельвина. Например, в кремнии ЭДЖ образуется при температуре ниже 30 К.

Рассмотрим ЭДЖ в пленках алмаза с толщиной в несколько нанометров [107]. В разделах 2.1 и 2.2 численные и аналитические вычисления показали, что ЭДЖ квантовых ямах Si/SiGe/Si может быть многокомпонентной. В пленках алмаза также возможно образование многокомпонентной ЭДЖ, которая содержит электроны, тяжелые, легкие и спин-орбитально расщепленные (SO) дырки. В настоящей работе используется теория функционала плотности для вычисления энергии ЭДЖ в пленках алмаза с толщиной в несколько нанометров. Для учета

обменно-корреляционной энергии используется приближение локальной плотности.

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

В алмазе имеется шесть долин для электронов с продольными массами  $m_{el} = 1,4m_0$  и поперечными массами  $m_{et} = 0,36m_0$  [108] ( $m_0$  – масса свободного электрона). Валентная зона в алмазе двукратно вырождена [108], в результате чего существуют тяжелые дырки с массой  $m_{hh}= 0,57m_0$  и легкие дырки с массой  $m_{hl} = 0,32m_0$ . Также существует и третья дырочная зона [108] с массой SO дырок  $m_{so}=0,39m_0$ . Для этих значений масс получаем  $a_{ex}=1,38$  нм,  $Ry_{ex}=92,1$  мэВ.

Представляет интерес изучения свойств ЭДЖ в алмазных пленках с толщиной в несколько нанометров. Для нахождения энергии ЭДЖ используем результаты раздела 2.1, в котором изучалась трехкомпонентная ЭДЖ в квантовых ямах. Аналогично (2.22) запишем энергию на одну электронно-дырочную пару для четырехкомпонентной ЭДЖ:

$$E_{eh} = -0.69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,e}}{\mu} \right)^{1/5} N_e^{2/5} - 0.69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,hh}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hh}^{7/5}}{N_e} - 0.69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,hl}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{hl}^{7/5}}{N_e} - 0.69K^{6/5} \left( \frac{m_{z,so}}{\mu} \right)^{1/5} \frac{N_{so}^{7/5}}{N_e} + \pi \frac{\mu}{g_e m_{d,e}} N_e + \pi \frac{\mu}{m_{d,hh}} \frac{N_{hh}^2}{N_e} + \pi \frac{\mu}{m_{d,hl}} \frac{N_{hl}^2}{N_e} + \pi \frac{\mu}{m_{d,so}} \frac{N_{so}^2}{N_e}, \quad (2.41)$$

где  $K=1,3$ ,  $m_{z,i}$  – поперечные массы,  $m_{d,i}$  – массы плотности состояний,  $N_i$  – двумерные плотности носителей заряда,  $i = e, hh, hl, so$ .

В выражении (2.41) первые четыре слагаемые соответствуют сумме поперечной кинетической и обменной энергии электронов и трех видов дырок. Последние четыре слагаемые соответствуют продольным кинетическим энергиям электронов и дырок для электронейтральной ЭДЖ  $N_e = N_{hh} + N_{hl} + N_{so} = N$ .

Плотности дырок находятся из условия электронейтральности ЭДЖ и равенства уровней Ферми для каждого типа дырок:

$$E_{hh} + \frac{2\pi\mu N_{hh}}{m_{d,hh}} = E_{hl} + \frac{2\pi\mu N_{hl}}{m_{d,hl}} = E_{so} + \frac{2\pi\mu N_{so}}{m_{d,so}}, \quad (2.42)$$

где уровни энергий дырок находятся из выражения (2.20).

Для вычислений мы использовали следующие параметры: для поверхности (100)  $m_{z,e} = 1,4m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,36m_0$ ,  $g_e = 2$ ; для поверхности (111)  $m_{z,e} = 0,46m_0$ ,  $m_{d,e} = 0,56m_0$ ,  $g_e = 6$ ; массы дырок для обеих поверхностей –  $m_{z,hh} = 0,57m_0$ ,  $m_{d,hh} = 0,57m_0$ ,  $m_{z,hl} = 0,32m_0$ ,  $m_{d,hl} = 0,32m_0$ ,  $m_{z,so} = 0,39m_0$ ,  $m_{d,so} = 0,39m_0$ . Результаты вычислений для пленок алмаза с поверхностями (100) и (111) приведены на рисунке 2.25. Видно, что равновесная плотность электронно-дырочных пар значительно выше для поверхности (111) и

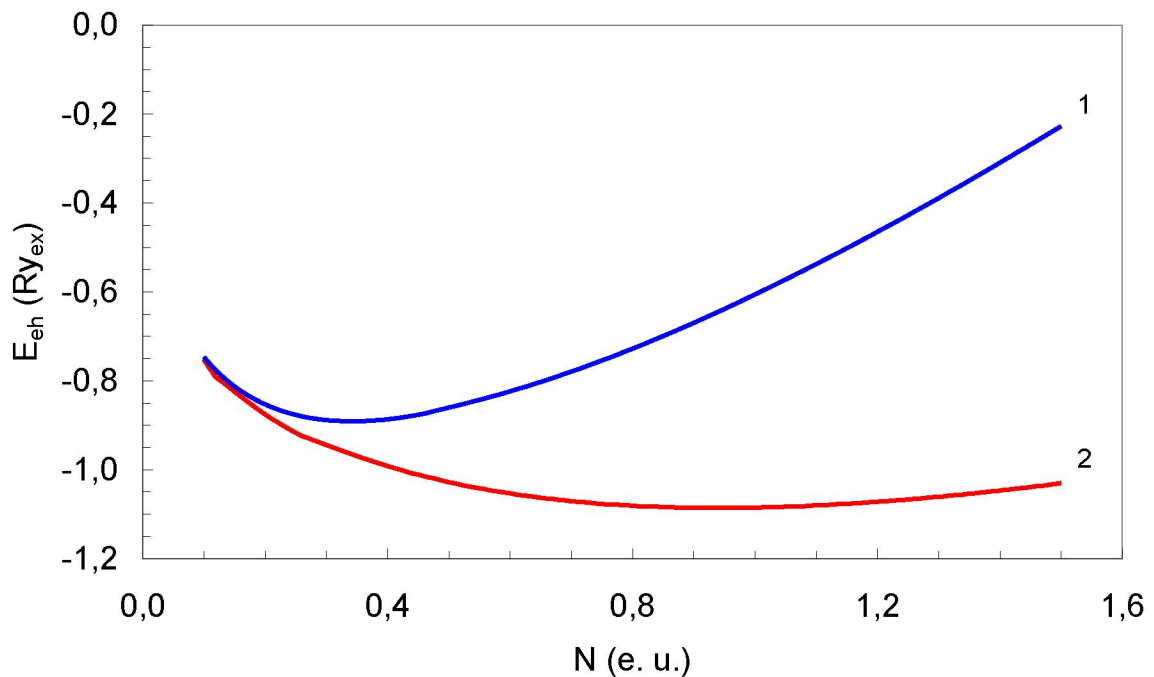


Рисунок 2.25 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар. 1 - поверхность (100), 2 - поверхность (111)

составляет  $N = 0,95$ , при этом  $N_{hh} = 0,49$ ,  $N_{hl} = 0,18$ ,  $N_{so} = 0,28$ . Увеличение плотности для поверхности (111) в основном связано с тем, что у этой поверхности имеется шесть нижних эквивалентных долин для электронов. Для поверхности (100) равновесная плотность  $N = 0,34$ , при этом  $N_{hh} = 0,25$ ,  $N_{hl} = 0$ ,  $N_{so} = 0,09$ . Отметим, что для алмазной пленки с поверхностью (100)

ЭДЖ является трехкомпонентной и состоит из электронов, тяжелых и спин-отщепленных дырок.

Для оценки критической температуры используем формулу, предложенную в работе [109]. В этой работе показано, что для трехмерной ЭДЖ критическая температура пропорциональна кубическому корню из плотности электронно-дырочных пар. Для алмазной пленки толщиной около радиуса экситона получаем для поверхности (111) трехмерную плотность электронно-дырочных пар  $n = N/a_{ex} = 3,610^{20} \text{ см}^{-3}$ . Эта величина плотности более чем в три раза превосходит плотность трехмерной ЭДЖ, поэтому следуя работе [109] получим критическую температуру  $T_c = 260 \text{ К}$ .

Вычислим энергию и равновесную плотность ЭДЖ в пленках алмаза, используя численные решения уравнений Кона-Шэма [110]. Для этого обобщим метод, предложенный в разделе 2.2, на четырехкомпонентную ЭДЖ. Рассмотрим квазидвумерную ЭДЖ с электронами, тяжелыми, легкими и SO дырками. Алмазная пленка помещена между двумя широкозонными диэлектриками, и считаем, что гетеропереходы создают квантовые ямы для электронов и дырок:

$$U_i(z) = \begin{cases} \Delta_i, & |z| \leq d/2 \\ V_i, & |z| > d/2 \end{cases}, \quad (2.43)$$

где  $d$  – ширина алмазной пленки,  $i=e, hh, hl, so$ .

Величина  $\Delta_i$  введена для учета спинового расщепления валентной зоны (the valence band spin splitting) и  $\Delta_{so} = 0,066$  [108],  $\Delta_e = \Delta_{hh} = \Delta_{hl} = 0$ .

При этом для простоты предполагаем, что  $U_e = U_{hh} = U_{hl} = U_{so} = U$  и не учитываем различие диэлектрических проницаемостей алмаза и диэлектрика.

В рамках теории функционала плотности полная энергия квазидвумерных электронов и трех типов дырок запишется

$$E_t[n_e, n_{hh}, n_{hl}] = T_e[n_e] + T_{hh}[n_{hh}] + T_{hl}[n_{hl}] + T_{so}[n_{so}] + \frac{1}{2} \int V_c(z)(n_e(z) - n_h(z))dz + \int U_e(z)n_e(z)dz + \int U_{hh}(z)n_{hh}(z)dz + \int U_{hl}(z)n_{hl}(z)dz + \int U_{so}(z)n_{so}(z)dz + E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}, n_{so}], \quad (2.44)$$

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

Уравнения Кона-Шэма для квазидвумерных электронов и трех типов дырок запишутся в следующем виде [110]

$$\left( -\frac{\mu}{m_{z,i}} \frac{d^2}{dz^2} + V_{eff,i}(z) \right) \psi_{n,i}(z) = E_{n,i} \psi_{n,i}(z), \quad (2.45)$$

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.

Электростатический потенциал задается:

$$V_c(z) = 8\pi \int_{-\infty}^z (z - z') [n_h(z') - n_e(z')] dz', \quad (2.46)$$

Когда заполнены только нижние подзоны, плотности носителей задаются выражениями:

$$n_e(z) = N_e \psi_{0,e}^2(z), n_{hh}(z) = N_{hh} \psi_{0,hh}^2(z), n_{hl}(z) = N_{hl} \psi_{0,hl}^2(z), n_{so}(z) = N_{so} \psi_{0,so}^2(z), \quad (2.47)$$

где  $N_e, N_{hh}, N_{hl}, N_{so}$  – двумерные плотности электронов, тяжелых, легких дырок и SO дырок, соответственно.

Кинетическая энергия имеет вид (2.6).

Для обменно-корреляционной энергии используем приближение [79]:  $E_{xc}[n_e, n_{hh}, n_{hl}, n_{so}] = E_{xc}[n_e, n_h]$ . Тогда в рамках приближения локальной плотности обменно-корреляционные потенциалы имеют вид:

$$V_{xc,e}(z) = \frac{d(n_e \varepsilon_{xc})}{dn_e}, V_{xc,hh}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hh}}, V_{xc,hl}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{hl}}, V_{xc,so}(z) = \frac{d(n_h \varepsilon_{xc})}{dn_{so}}, \quad (2.48)$$

Для обменно-корреляционной энергии  $\varepsilon_{xc}$  используется выражение (2.9).

Здесь рассматривается электронейтральная ЭДЖ, когда  $N_e = N_{hh} + N_{hl} = N$ . Энергию на одну электронно-дырочную пару будем отсчитывать от



нижних уровней энергии электрона  $E_e$  и тяжелой дырки  $E_{hh}$  в пустых ямах:  $E_{eh} = -E_e - E_{hh} + E_t/N$ . Плотности дырок находятся из выражения (2.42).

Нелинейные уравнения Кона-Шэма решаются численно для (100) и (111) пленки алмаза.

Рисунок 2.26 показывает зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для (100) пленки алмаза. Минимум энергии дает энергию основного состояния  $E_{gs}$  и равновесную плотность  $N_{eq}$  электронно-дырочных пар. Уменьшение энергии при  $d=1$  и  $U=20$  в основном связано с изменением обменно-корреляционной энергии.

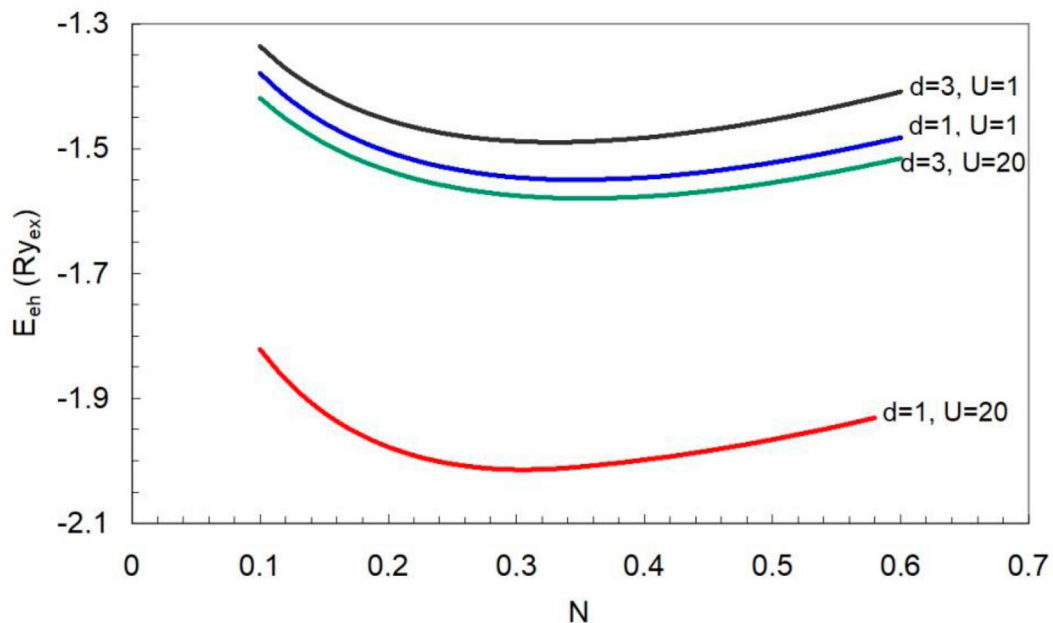


Рисунок 2.26 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для (100) пленки алмаза

Во всех случаях ЭДЖ близка к локальной нейтральности, т. е.  $n_e(z) \approx n_h(z)$ , и вклад электростатической энергии в полную энергию мал. Так при  $d=1$  и  $U=1$  электростатическая энергия составляет около 3 процентов от полной энергии. Во всех остальных случаях вклад электростатической энергии в полную энергию меньше 1 процента. Для параметров, приведенных на рисунке 2.26, ЭДЖ имеет равновесную плотность  $N_{eq} \approx 0,3$ . При  $U=1$  ЭДЖ

является четырехкомпонентной с плотностями дырок  $N_{hh} \approx 0,18$ ,  $N_{hl} \approx 0,08$ ,  $N_{so} \approx 0,08$ .

Рисунок 2.27 показывает зависимость плотностей электронов, тяжелых, легких и SO дырок от ширины квантовой ямы при  $U=20$ . При малых значениях  $d$  ЭДЖ является двухкомпонентной и состоит из электронов и тяжелых дырок. Отсутствие легких и SO дырок в ЭДЖ связано с сильным влиянием внешнего потенциала на уровни энергии носителей заряда при малых  $d$ . При малых значениях  $U$  ЭДЖ всегда является четырехкомпонентной.

Для (111) пленки алмаза число эквивалентных долин электронов  $g_e = 6$ , что приводит к уменьшению кинетической энергии электронов. Рисунок 2.28 показывает зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для (111) пленки алмаза. Равновесная плотность электронно-дырочных пар увеличивается примерно в 3 раза по сравнению с плотностью в (100) пленке алмаза. Следует также отметить уменьшение энергии электронно-дырочных пар. Увеличение равновесной плотности электронно-дырочных пар и уменьшение энергии ЭДЖ в основном связано с уменьшением кинетической энергии электронов.

Рисунок 2.29 показывает зависимости плотностей электронно-дырочных пар от ширины квантовой ямы при  $U=1$  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 [109] 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 [27].

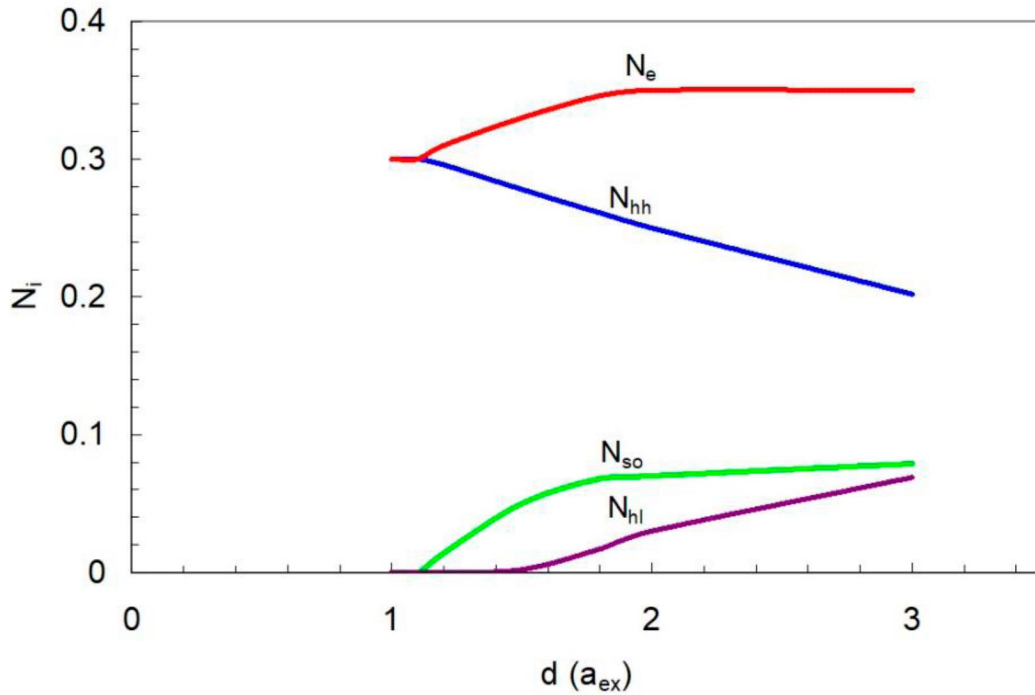


Рисунок 2.27 – Зависимости плотностей электронов, тяжелых, легких и SO дырок от ширины квантовой ямы при  $U=20$  для (100) пленки алмаза

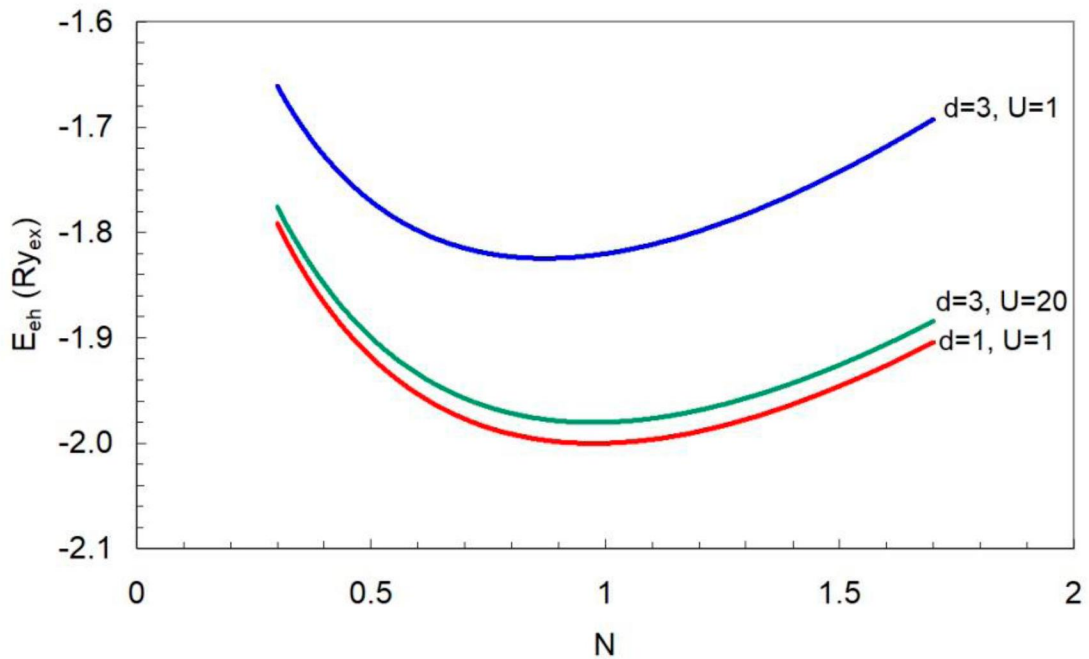


Рисунок 2.28 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от двумерной плотности пар для (111) пленки алмаза

Рисунок 2.30 показывает зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от глубины потенциальных ям для различных ширин квантовых ям. Величина энергии основного состояния может достигать

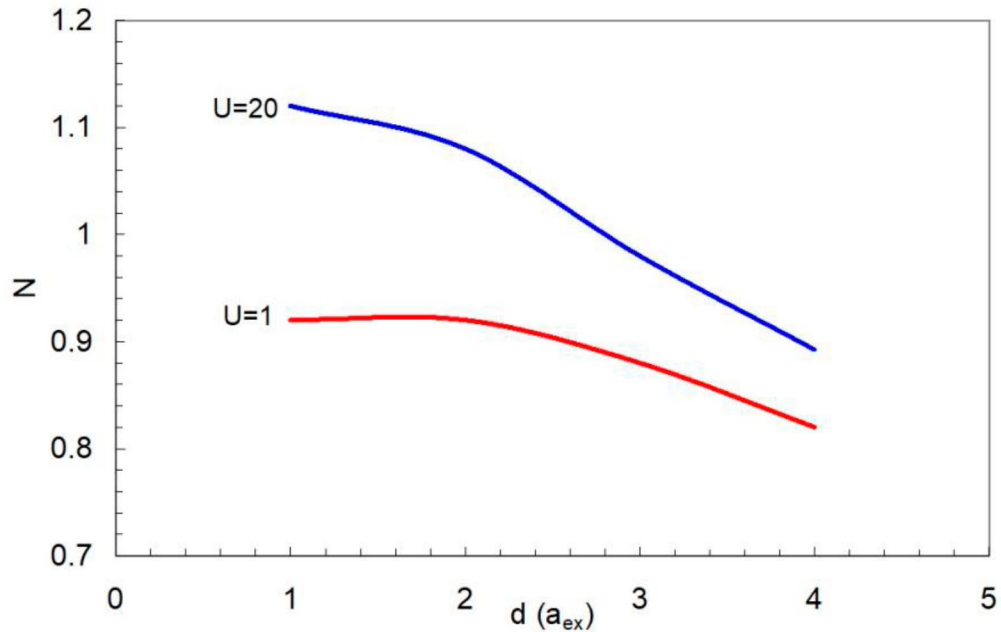


Рисунок 2.29 – Зависимости плотностей электронно-дырочных пар от ширины квантовой ямы для (111) пленки алмаза

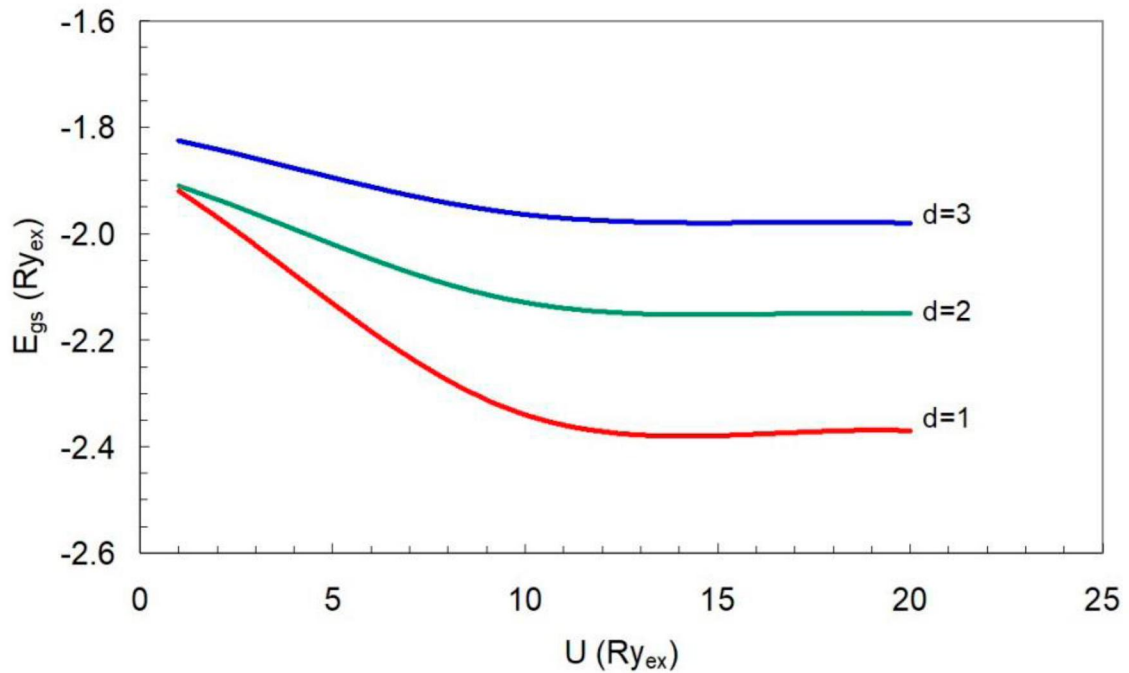


Рисунок 2.30 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от глубины потенциальных ям для (111) пленки алмаза

значения  $E_{gs} = -2,4$  ( $-220$  meV), что значительно меньше величины энергии трехмерной ЭДЖ  $-130$  meV [100]. В объемных полупроводниках критическую температуру ЭДЖ можно оценить как  $T_c = 0,1|E_{gs}|/k_B$  [100, 111]. Используя это выражение для пленок алмаза, получаем  $T_c = 260$  К.

## 2.7 Основные выводы

В этой главе для вычисления энергии и равновесной плотности квазидвумерной ЭДЖ используется теория функционала плотности. Численно и приближенно аналитически решались уравнения Кона-Шэма.

Предложен оригинальный метод приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера. Этот метод позволил аналитически выразить энергию квазидвумерной ЭДЖ через такие параметры как массы электрона и дырки, анизотропию масс, число эквивалентных долин. Исследовано влияние анизотропии масс электронов и числа долин на энергию электронно-дырочной пары. Показано, что в отличие от трехмерной ЭДЖ в квазидвумерном случае анизотропия масс электронов увеличивает энергию связи электрона и дырки. Показано влияние анизотропии масс электронов и числа долин в кремнии на свойства ЭДЖ в квантовых ямах  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ . Наибольшая энергия связи и плотность пар получена для поверхности кремния (111). Предложенная модель легко обобщается для структур, в которых существует барьер для дырок и квантовая яма для электронов. Полученные аналитические результаты могут использоваться для оценки параметров квазидвумерной ЭДЖ в других полупроводниках.

Получено аналитическое выражение для энергии трехкомпонентной ЭДЖ в мелких квантовых ямах. Вычислена энергия и равновесная плотность электронно-дырочных пар для структуры  $\text{Si}/\text{SiGe}/\text{Si}$ . Показано, что при малом расщеплении между уровнями энергии легких и тяжелых дырок ЭДЖ содержит как легкие, так и тяжелые дырки. С увеличением расщепления происходит переход к ЭДЖ с тяжелыми дырками, причем

равновесная плотность сильно уменьшается. Для равновесной плотности электронно-дырочных пар получено удовлетворительное согласие между модельными и экспериментальными результатами.

Показано, что в ЭДЖ в квантовых ямах Si/SiGe/Si возможна бистабильность, при которой на свойства ЭДЖ может влиять слабое внешнее воздействие. Изучено влияние внешнего электрического поля на свойства ЭДЖ. Показано, что в случае положительно заряженной ЭДЖ минимум энергии в состоянии с легкими и тяжелыми дырками уменьшается по сравнению с минимумом энергии ЭДЖ с тяжелыми дырками.

Подробно изучены свойства ЭДЖ в квантовых ямах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si с различными ширинами ям (барьеров) и содержанием германия. Для этого численно решались три одномерных нелинейных уравнений Шредингера для электронов, легких и тяжелых дырок. Показано, что в мелких квантовых ямах (низкая концентрация германия) образуется трехкомпонентная ЭДЖ. С увеличением содержания германия происходит переход к двухкомпонентной ЭДЖ, причем равновесная плотность электронно-дырочных пар сильно уменьшается. Получено, что диапазон стабильности трехкомпонентной ЭДЖ по параметру  $x$  увеличивается с уменьшением ширины квантовой ямы и расщепления между подзонами легких и тяжелых дырок. Результаты вычислений очень хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Для вычисления энергии ЭДЖ и нахождения равновесной плотности электронно-дырочных пар в квантовой яме SiO<sub>2</sub>/Si/SiO<sub>2</sub> численно решались нелинейные уравнения Шредингера для электронов и дырок. Вычисления проводились для поверхностей кремния (100) и (111). Наибольшая энергия связи и равновесная плотность электронно-дырочных пар получена для поверхности кремния (111). Показано, что энергия связи ЭДЖ по отношению к распаду на экситоны может быть больше  $Ry_{ex}$ , что значительно превышает энергию связи трехмерной ЭДЖ. Проведены

расчеты для квантовых ям различной ширины и найдено, что с увеличением ширины квантовой ямы энергия связи и равновесная плотность уменьшаются. Получено удовлетворительное согласие вычисленных значений равновесной плотности с экспериментальными результатами для поверхности кремния (100). Также найдено хорошее согласие результатов численных расчетов с результатами аналитических вычислений.

Вычислены плотности электронов и дырок в зависимости от напряженности электрического поля и ширины квантовой ямы  $\text{SiO}_2/\text{Si}/\text{SiO}_2$ . Показано, что в широкой квантовой яме происходит сильное расслоение электронов и дырок. Найдены зависимости равновесной плотности электронно-дырочных пар от напряженности электрического поля и ширины квантовой ямы для (111) Si и (100) Si. Вычисленная равновесная плотность электронно-дырочных пар уменьшается при увеличении напряженности электрического поля. Особенно сильное уменьшение плотности происходит в широких квантовых ямах, в которых электрическое поле может разрушить ЭДЖ. Для (100) Si в широких квантовых ямах переход к электронно-дырочной плазме происходит в меньшем электрическом поле, чем для (111) Si.

Впервые в рамках теории функционала плотности получено аналитическое выражение для энергии трехкомпонентной ЭДЖ в магнитном поле. Вычислена энергия и равновесная плотность электронно-дырочных пар для структуры Si/SiGe/Si. Показано, что при увеличении магнитного поля происходит переход от двухкомпонентной к трехкомпонентной ЭДЖ, причем равновесная плотность сильно увеличивается. Изменяя магнитное поле можно управлять переходом между трехкомпонентной и двухкомпонентной ЭДЖ. 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 диапазоне

магнитных полей от 0 до 50 Тл плотность электронно-дырочных пар увеличивается в два раза для трехкомпонентной ЭДЖ и почти в три раза для двухкомпонентной.

Найдена энергия основного состояния ЭДЖ в пленках алмаза. Показано, что в пленках алмаза возможно образование четырехкомпонентной ЭДЖ. Найдены зависимости равновесной плотности электронно-дырочных пар от глубины и ширины квантовой ямы для (111) и (100) пленок алмаза. Наибольшая равновесная плотность и наименьшая энергия наблюдается в узких (111) пленках алмаза. Плотность ЭДЖ в пленках алмаза значительно выше, чем в кристаллах алмаза. На основе вычисленной энергии и равновесной плотности ЭДЖ проведена оценка критической температуры ЭДЖ, которая оказалась близкой к комнатной температуре.



## ГЛАВА 3

### Исследование свойств двумерных электронов в сильном магнитном поле

#### 3.1 Электронная структура квантовой точки в магнитном поле

Известно, что кулоновское взаимодействие электронов в квантовой точке играет существенную роль, поэтому представляет интерес расчет электронной плотности и уровней энергии электронов в квантовой точке с учетом межэлектронного взаимодействия, а также характер изменения плотности заряда под действием внешнего возмущения. Численная диагонализация многочастичного гамильтониана 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 (ТФП).

В настоящем разделе исследуются электронные свойства двумерных квантовых точек в перпендикулярном магнитном поле с помощью ТФП.

В дальнейшем будем использовать 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,  $\epsilon$  — 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.

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

$$E[n] = T[n] + E_{ext}[n] + E_H[n] + E_{xc}[n], \quad (3.1)$$

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 (3.1) связано с внешним взаимодействием и в двумерном случае задается выражением

$$E_{ext}[n] = \int V_{ext}(r)n(r)dr, \quad (3.2)$$

$$\text{где } V_{ext}(r) = 2 \int_0^R \frac{n_p}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' - \frac{2z_0}{r}, \quad (3.3)$$

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 (3.3)) заменяется параболическим потенциалом, равным  $V(r) = \frac{\omega_0^2}{4} r^2$ . Действительно, при малых  $r$  первое слагаемое в выражении (3.3) имеет квадратичную зависимость от  $r$ , при этом

$$\omega_0 = \frac{2(\pi n_p)^{3/4}}{N^{1/4}}. \quad (3.4)$$

Кулоновская энергия имеет следующий вид

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \int V_H(r)n(r)dr, \quad (3.5)$$

$$\text{где } V_H(r) = 2 \int_0^\infty \frac{n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (3.6)$$

Трудность ТФП состоит в том, что вид обменно-корреляционной энергии  $E_{xc}[n]$  в общем случае неизвестен. На практике используют различные приближения для обменно-корреляционной энергии. В дальнейшем нами учитывается только обменная энергия и для нее используется приближение локальной плотности:

$$E_x[n] = \int \varepsilon_x(n) dr - \sum_m \int \left( \varepsilon_x(n_m) + \frac{1}{2} V_{H,m}(r) \right) n_m(r) dr, \quad (3.7)$$

где  $V_{H,m}(r) = 2 \int_0^\infty \frac{n_m(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dr'$ ,  $n_m(r)$  — плотность  $m$ -го электрона,  $\varepsilon_x(n)$  —

обменная энергия на один электрон для однородного электронного газа, которая для нижнего спинового уровня Ландау имеет следующий вид:

$$\varepsilon_x(n) = -\sqrt{2\pi} \pi L n(r), \quad (3.8)$$

здесь  $L$  — магнитная длина.

Следует остановиться подробнее на формуле (3.7). В приближении локальной плотности компенсация самодействия электронов в обменной и кулоновской энергии оказывается неполной. Когда число электронов конечно и мало, необходимо исключить самодействие электронов в обменной и кулоновской энергии отдельно, что и сделано в выражении (3.7).

Вычисления [112, 113] будут проводиться для магнитных полей, при которых все двумерные электроны являются спин-поляризованными. Варьируя энергию (3.1) и учитывая круговую симметрию, получаем уравнения Кона-Шэма для спин-поляризованных электронов

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{4L^4} + \frac{m^2}{r^2} - \frac{m}{L^2} + V_{eff}(r) \right\} \psi_m(r) = E_m \psi_m(r), \quad (3.9)$$

с эффективным одночастичным потенциалом

$$V_{eff}(r) = V_H(r) - V_{H,m}(r) + 2\alpha(n(r) - n_m(r)) + V_{ext}(r), \quad (3.10)$$

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

$$\alpha = -\sqrt{2\pi} \pi L.$$

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решалась численно с помощью метода итераций. Итерационный процесс продолжался пока собственные значения  $E_m^{(k)}$  на  $k$ -ой итерации и  $(k+1)$ -ой итерации не

удовлетворяли условию  $|E_m^{(k+1)} - E_m^{(k)}| \leq \delta \cdot E_m^{(k+1)}$ , где для разных задач величина  $\delta$  изменялась в пределах от  $10^{-4}$  до  $10^{-5}$ .

Проведено сравнение полученных результатов с точными результатами [12, 13]. На рисунке 3.1 результаты расчетов [112] сопоставляются с точными результатами, полученными в работе [13]. 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

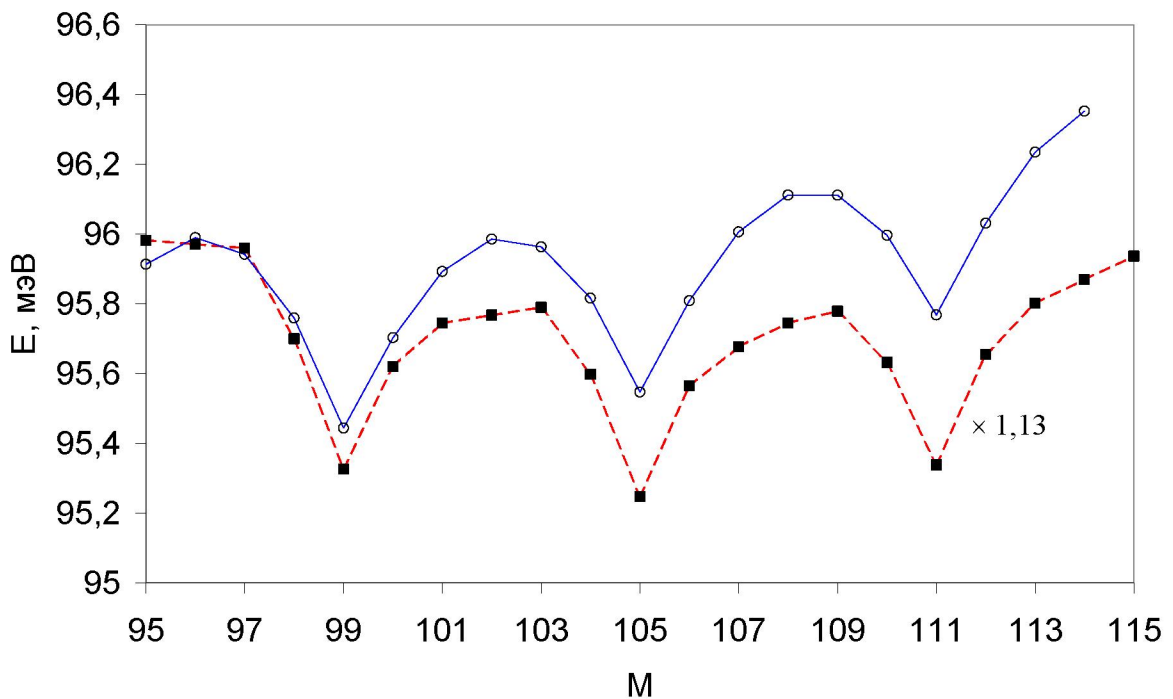


Рисунок 3.1 – Зависимость энергии от суммарного углового момента всех электронов ( $N=7$ ,  $B=18,8$  Тл,  $\hbar\omega_0=3$  мэВ). ■ — точный результат [13], ○ — ТФП [112]. Энергия отсчитывается от величины  $(\omega_0^2 + 1/L^4)^{1/2}$ . Точки соединены линиями для наглядности

будет меньше. Самое главное, что получены такие же магические 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. Например, для

состояния с  $M=99$  конфигурация электронов будет  $\{0, 14, 15, 16, 17, 18, 19\}$ , а для  $M=105$  -  $\{0, 15, 16, 17, 18, 19, 20\}$ . Максимум волновой функции электрона  $R_m \approx (2m)^{1/2}L$ , поэтому волновая функция электрона с  $m=0$  не перекрывается с волновыми функциями других электронов, которые имеют компактную конфигурацию.

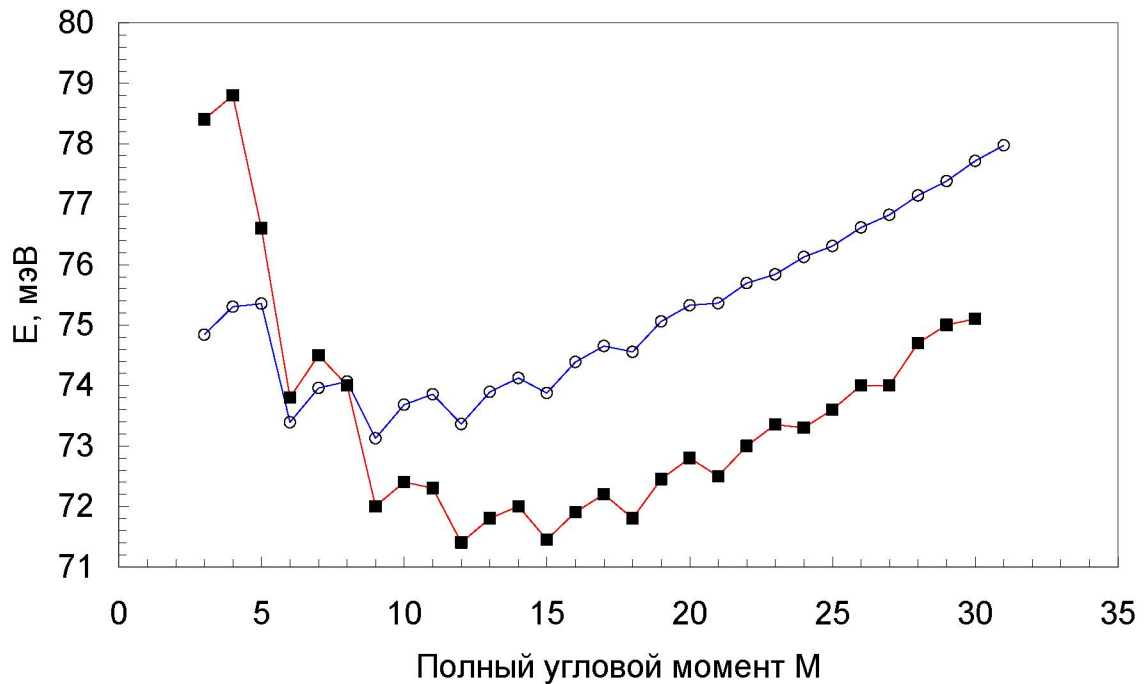


Рисунок 3.2 – Зависимость полной энергии от суммарного углового момента электронов ( $N=3$ ,  $B=20$  Т,  $\hbar\omega_0=4$  мэВ). ■ – точный результат [12], ○ – ТФП

На рисунке 3.2 результаты расчетов сравниваются с точными результатами [12]. Различие между результатами, полученными с использованием ТФП, и точными результатами [12] составило менее 5 процентов, и были получены те же магические числа, как и в точных вычислениях. Здесь получен период  $\Delta M=N$  в обоих случаях. Отметим, что проведенные вычисления показали, что с уменьшением частоты  $\omega_0$  (понижением плотности электронов) появляется новый период  $\Delta M=N-1$  и основное состояние сдвигается в область больших  $M$ .

Результаты самосогласованных вычислений для GaAs квантовой точки с  $N=7$  показаны на рисунке 3.3. Видно, что магические числа для полного углового момента электронов имеют периоды  $\Delta M = N - k$  ( $k = 0, 1$ ). Отметим, что состояние с  $M = 56$  имеет конфигурацию электронов  $\{5,6,7,8,9,10,11\}$ , а состояние с  $M = 63$  –  $\{0,8,9,10,11,12,13\}$  и переход между этими состояниями (при  $B \approx 7,28$  Тл) будет сопровождаться

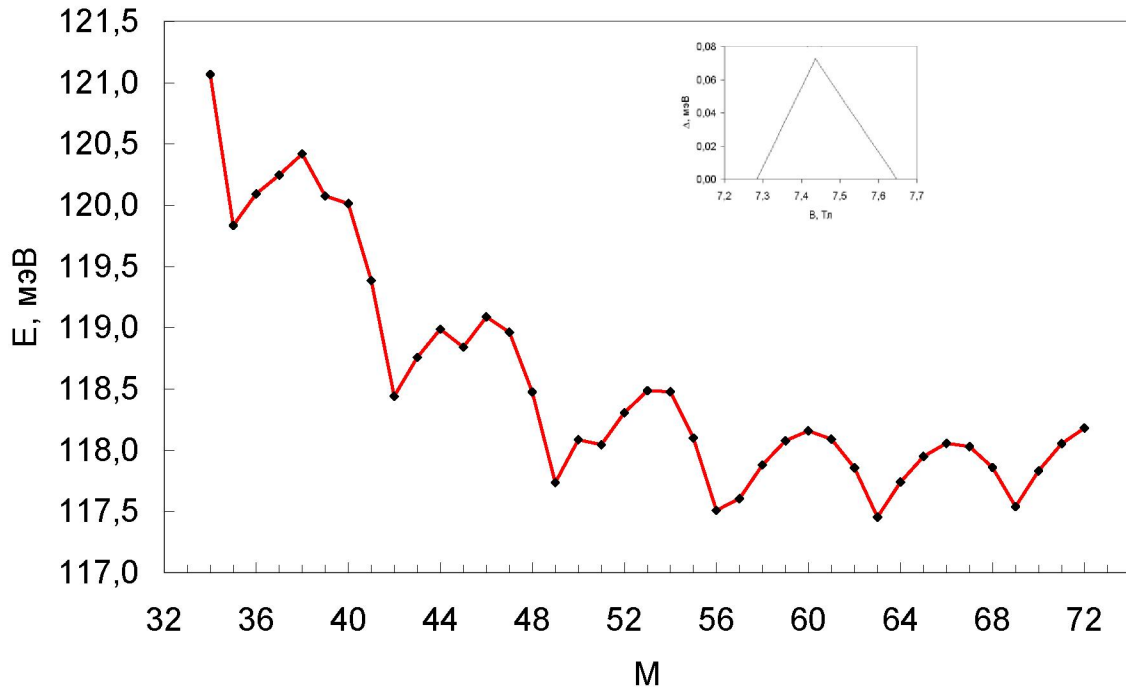


Рисунок 3.3 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N=7$ ,  $B = 7,4$  Тл,  $\hbar\omega_0 = 2$  мэВ). Точки соединены линиями для наглядности. На вставке показана зависимость энергетической щели от напряженности магнитного поля

сильным изменением конфигурации электронов. Вычислена энергетическая щель  $\Delta$  (разность энергий между основным и ближайшим по энергии метастабильным состоянием) для  $M = 63$  (вставка на рисунке 3.3). Отметим, что для данных параметров  $\Delta < 1$  К.

На рисунке 3.4 приведена зависимость суммарного углового момента всех электронов от напряженности магнитного поля  $B$  в квантовой точке с  $N = 7$  и при  $\hbar\omega_0 = 2$  мэВ. Зависимость  $M(B)$  имеет форму плато. При низких

магнитных полях электроны имеют компактную конфигурацию и  $M = M_0 = N(N-1)/2 = 21$ . Переход в неполяризованное состояние не изучался, поэтому на рисунке 3.4 показана часть плато с  $M = 21$  для указания перехода к состоянию с  $M = 28$ . С увеличением магнитного поля компактная конфигурация электронов сохраняется и наблюдаются плато с  $M = M_0 + pN$ , где  $p = 1, 2, 3, 4, 5$ . Ширины плато с  $M = 28, 35, 42, 49$  близки друг к другу.

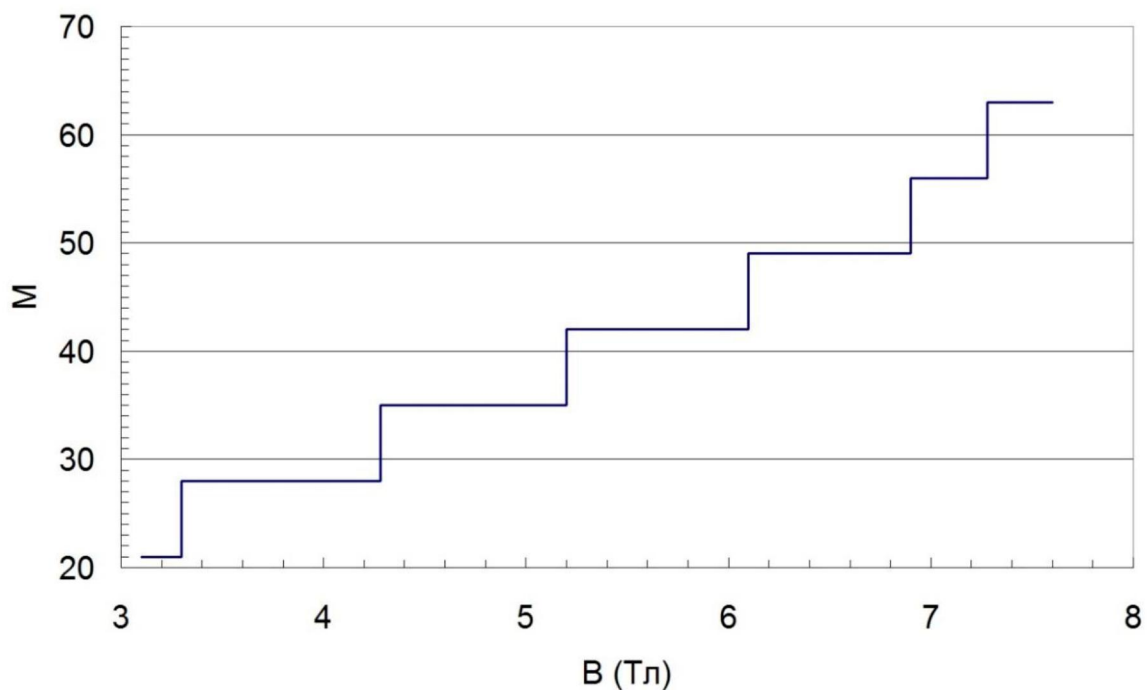


Рисунок 3.4 – Зависимость суммарного углового момента всех электронов от напряженности магнитного поля  $B$  ( $N=7$ ,  $\hbar\omega_0=2$  мэВ)

Плато с  $M = 56$  имеет ширину значительно меньше и за ним начинается переход к состоянию с  $M = 63$ , для которого конфигурация электронов имеет вид  $\{0,8,9,10,11,12,13\}$ . При такой конфигурации один электрон находится в центре квантовой точки и его волновая функция не перекрывается с волновыми функциями других электронов. Этот результат находится в согласии с результатами работы [13] (см. также рисунок 3.2).

На рисунке 3.5 представлены результаты расчетов для  $N = 9$ . Магические числа имеют такие же периоды как и для  $N = 7$ , однако период с  $k = 1$  возникает при большем отношении  $M_0/M$  ( $M_0$  – минимальный угловой момент всех электронов). В случае  $k = 1$  распределение электронной плотности имеет два пика (при  $r = 0$  и при  $r \neq 0$ ), т.е. в одночастичном приближении состояние с угловым моментом  $m = 0$  всегда занято.

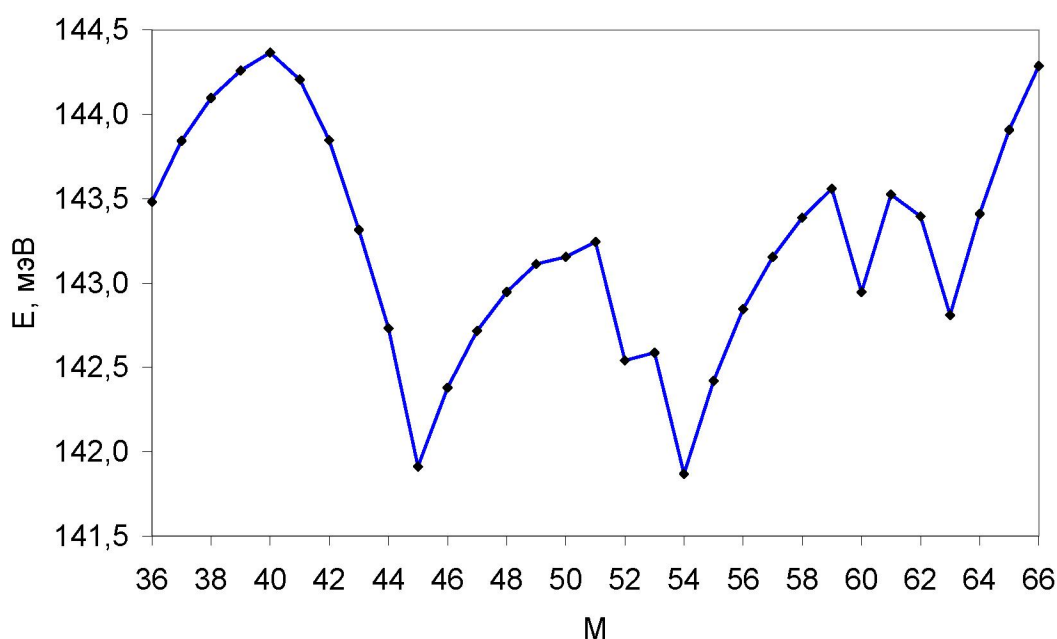


Рисунок 3.5 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N = 9$ ,  $B = 4$  Тл,  $\hbar\omega_0 = 2$  мэВ). Точки соединены линиями для наглядности

Проведенные расчеты показали, что не все метастабильные состояния с изменением напряженности магнитного поля становятся основными. В частности, состояния с  $M = 52$  и  $M = 60$  (что соответствует  $k = 1$ ) остаются метастабильными при любых  $B$ , а основными состояниями смогут стать только состояния с  $M = 36, 45, 54, 63$ . Состояния с периодом  $\Delta M = N - 1$  будут основными при более высоких магнитных полях.

В квантовой точке с  $N = 10$  появляется новая серия магических чисел с  $k = 2$  (рисунок 3.6). В этом случае состояния с угловыми



моментами  $m=0$  и  $m=1$  всегда заняты. На рисунке 3.6 наборы магических чисел  $\{55, 65, 76\}$ ,  $\{63, 72\}$ ,  $\{61, 69\}$  соответствуют значениям  $k=0, 1, 2$ , соответственно. Исследовано влияние заряженной примеси на электронную структуру квантовой точки и определено, что примесь изменяет основное состояние и частично разрушает набор магических чисел для полного углового момента электронов. Из результатов, представленных на рисунке 3.6, видно, что положительно заряженная примесь сдвигает основное состояние в сторону меньшего углового момента и период  $\Delta M = N - 2$ , т. е. на примеси локализуется два электрона. В случае присутствия отрицательно заряженной примеси основное состояние сдвигается в сторону большего  $M$  и существует только период  $\Delta M = N$ , т. е. все электроны имеют компактную конфигурацию.

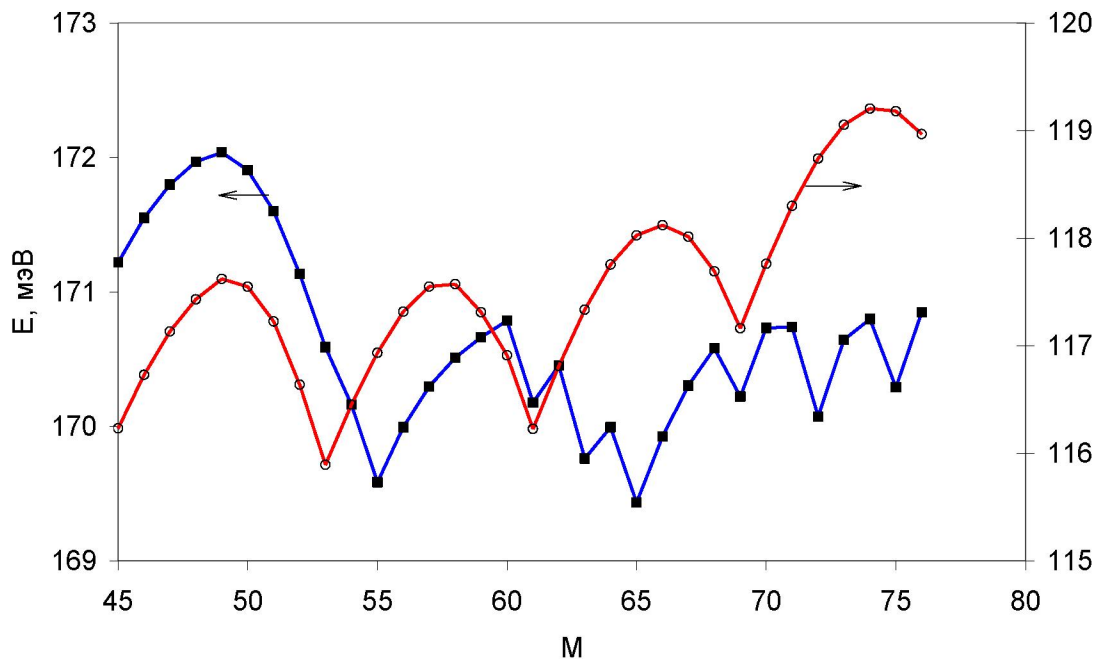


Рисунок 3.6 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N = 10$ ,  $B = 4$  Тл,  $\hbar\omega_0 = 2$  мэВ). ■ —  $z_0 = 0$ ; ○ —  $z_0 = 1$ . Точки соединены линиями для наглядности

С увеличением числа электронов (расчеты проводились для квантовых точек с числом электронов до 17) появляются новые серии магических

чисел с  $k = 3, 4, 5$ . 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 3.7 приведены результаты вычислений для квантовой точки с  $N = 14$ . Появились новые серии магических чисел, а именно:  $\{103, 115, 127, 139\}$  (соответствуют периоду  $\Delta M = N - 2$ ),  $\{113, 124, 135\}$  ( $\Delta M = N - 3$ ),  $\{111, 121, 131\}$  ( $\Delta M = N - 4$ ),  $\{109\}$  ( $\Delta M = N - 5$ ). Период  $\Delta M = N - k$  означает, что  $k$  электронов имеют компактную конфигурацию  $(0, 1, \dots, k-1)$  как в пространстве углового момента, так и в обычном пространстве. Основное состояние в случае  $z_0 = 0$  для параметров, указанных на рисунке 3.7, 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

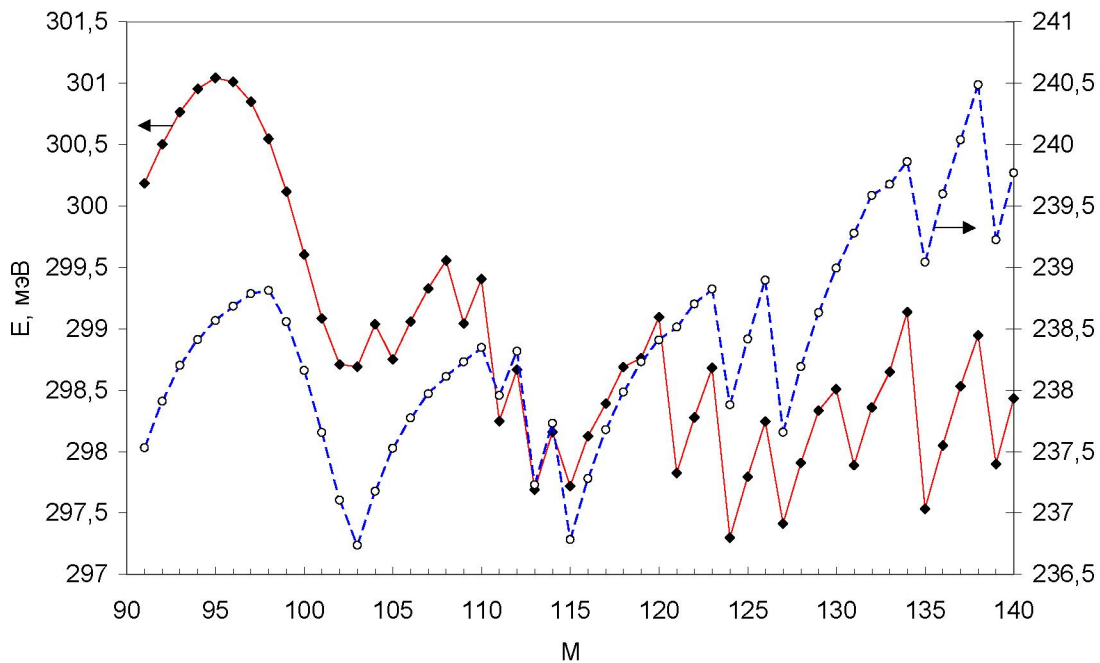


Рисунок 3.7 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента всех электронов ( $N=14$ ,  $B = 4$  Тл,  $\hbar\omega_0 = 2$  мэВ). ■ —  $z_0 = 0$ ; ○ —  $z_0 = 1$ . Точки соединены линиями для наглядности

разность энергий (щель) между этими состояниями составляет около одного градуса Кельвина. Также на рисунке 3.7 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.

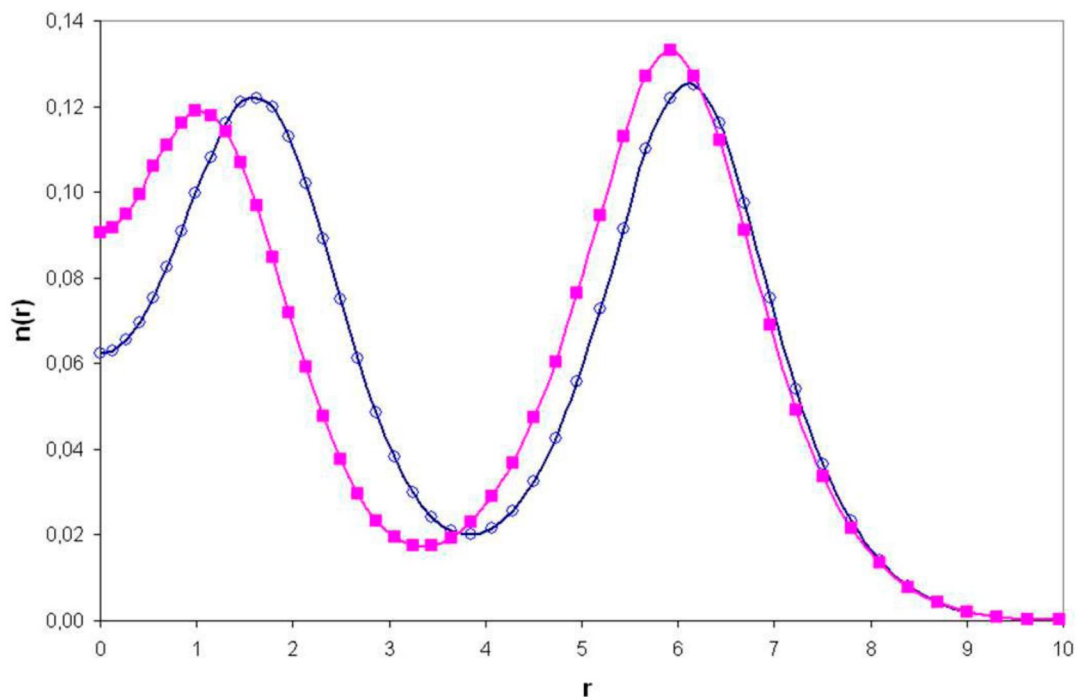


Рисунок 3.8 – Профиль плотности электронов в квантовой точке.  $N=14$ ,  $V=4$  Тл,  $\hbar\omega_0=2$  мэВ. -○- –  $M=124$  (0 1 2 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16); -■- –  $M=127$  (0 1 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16)

Профили плотности электронов для состояний с  $M=124$  и  $M=127$  приведены на рисунке 3.8. Видно, что электронная плотность сильно

неоднородная. Такая неоднородность связана с тем, что состояния с  $m = 3, 4, 5$  для  $M = 124$  и  $m = 2, 3, 4$  для  $M = 127$  являются незанятыми.

Выше показано, плотность электронов в квантовой точке является сильно неоднородной при  $M_0/M < 1$ . Следует ожидать, что кулоновское взаимодействие может приводить к неоднородной плотности при  $M = M_0$ . Для двумерных электронов в сильном магнитном поле отношение кулоновской энергии взаимодействия двух электронов  $2/L$  к их кинетической энергии  $2/L^2$  равно  $L$ . В случае  $L > 1$  будет преобладать кулоновское взаимодействие и в этом случае следует ожидать неоднородной плотности электронов. Были выполнены расчеты для случая  $L > 1$  и  $z_0 = 1$ . Внешний потенциал  $V_{ext}(r)$  создается примесью с зарядом  $z_0$  и положительно заряженным фоном плотности  $n_p$ . Удерживающий потенциал от положительно заряженного фона заменялся параболическим потенциалом при этом  $\omega_0 = 2(\pi n_p)^{3/4}/N^{1/4}$ . Вычисления проводились для  $n_p = 1/(2\pi L^2)$  и  $z_0 = 1$ . В этом случае все электроны имеют компактную конфигурацию. На рисунке 3.9 приведены результаты расчетов для квантовой точки с числом электронов  $N = 140$  при различных величинах напряженности магнитного поля. Видно, что профиль электронной плотности имеет осцилляционный вид, причем период осцилляций  $\approx \pi L$ . При  $B = 4$  Тл ( $n_p \approx 10^{11}$  см<sup>-2</sup>) электронная плотность почти постоянна и изменяется только вблизи примеси и границы. С уменьшением величины напряженности магнитного поля (средней плотности электронов) амплитуды осцилляций плотности растут и распределение электронной плотности принимает форму колец.

При напряженности магнитного поля ниже некоторой величины (экстраполяция представленных на рисунке 3.9 результатов дает  $B \approx 2,2$  Тл, что соответствует  $n_p \approx 5,5 \cdot 10^{10}$  см<sup>-2</sup>) электронная плотность в первом минимуме должна упасть до нуля и волновые функции электронов с  $m = 0$  и  $m = 1$  практически не перекрываются с волновыми функциями других

электронов. В этом случае эти электроны не будут участвовать в проводимости.

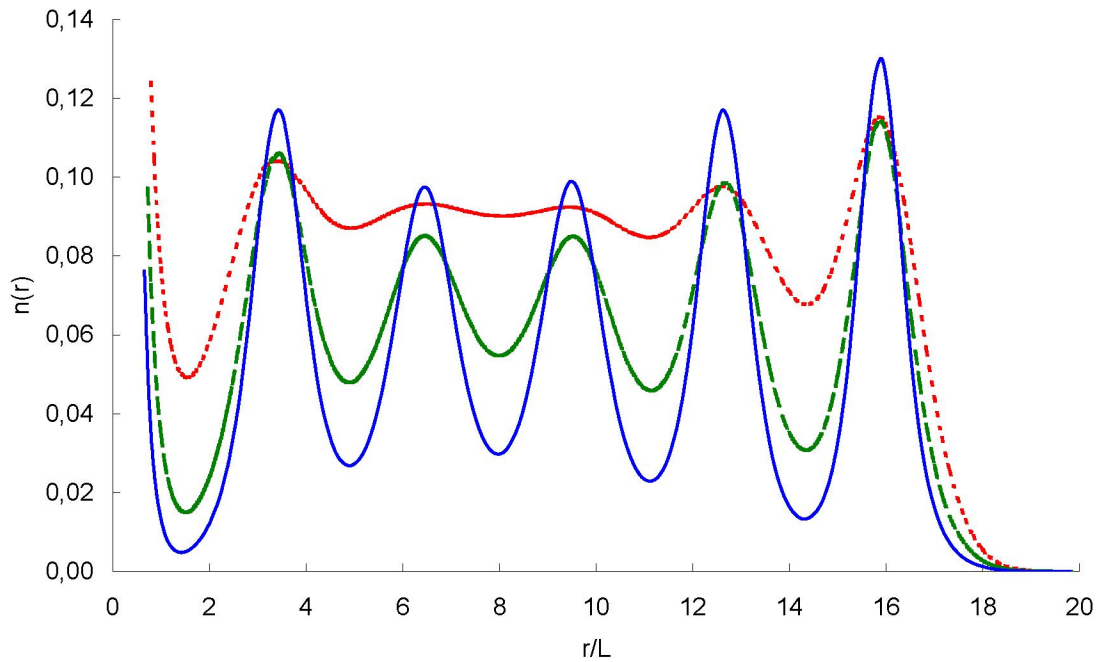


Рисунок 3.9 – Профили плотности электронов в квантовой точке с  $N=140$ ,  $z_0=1$  (сплошная линия -  $B=2,6$  Тл; штриховая линия -  $B=3$  Тл; пунктирная линия -  $B=4$  Тл)

Были проведены расчеты для неполяризованных электронов, находящихся на нижнем уровне Ландау. Находилась область магнитных полей, в которой электроны имеют компактную конфигурацию  $(0,1,\dots,N-1)$ . Для этого исследовался переход от компактной конфигурации к неполяризованному состоянию, а именно  $(0,1,\dots,N-1) \rightarrow (0,1,\dots,N-2,L)$ , где  $L$  — угловой момент электрона со спином, противоположным к спинам остальных электронов. Значение  $L$  определялась из минимума энергии. Этот переход на рисунке 3.10 обозначен кривой  $B_1$ . Кривая  $B_2$  на рисунке 3.10 показывает структурный переход  $(0,1,\dots,N-1) \rightarrow (1,2,\dots,N)$ , который близок к переходу от состояния с фактором заполнения уровня Ландау  $\nu=1$  к состоянию с  $\nu<1$ . При увеличении числа электронов  $N$  область существования компактной

конфигурации сужается, и следует ожидать, что с увеличением числа электронов ширина плато в целочисленном квантовом эффекте Холла будет уменьшаться. Для бесконечной системы с примесями можно предположить, что примеси способствуют разбиению двумерного электронного газа на области с небольшим числом электронов и таким образом ширина плато будет больше, чем в “чистых” образцах.

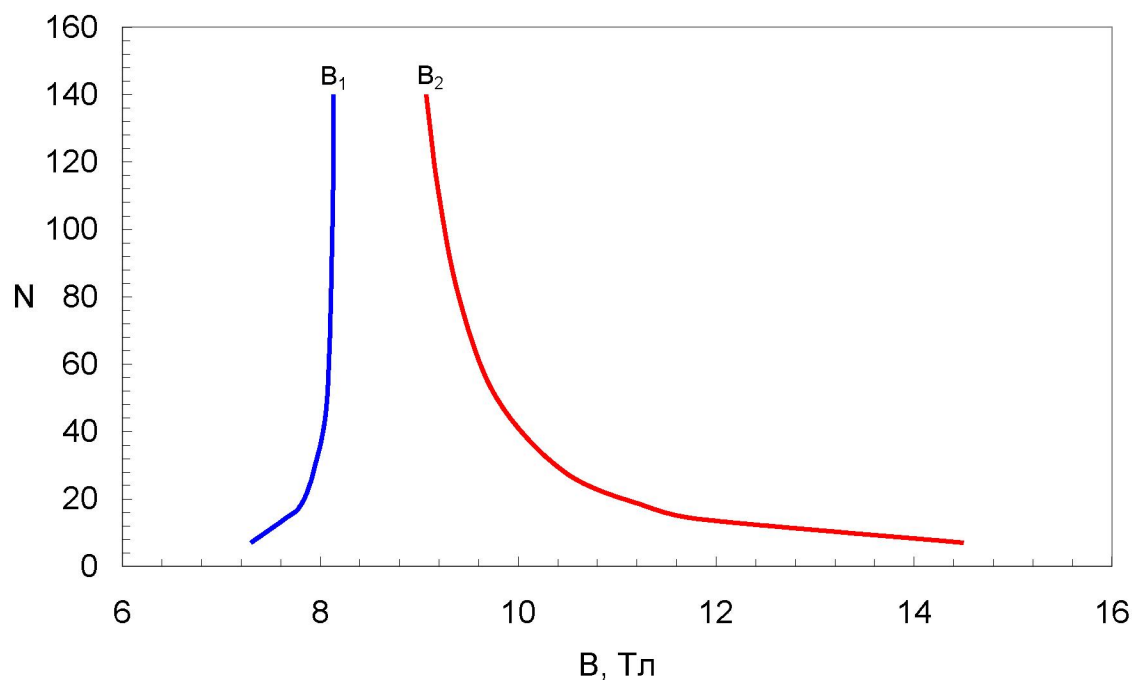


Рисунок 3.10 – Фазовая диаграмма перехода от спин-поляризованного состояния электронов с компактной конфигурацией в неполяризованное состояние (кривая B<sub>1</sub>) и в состояние с фактором заполнения уровня Ландау  $\nu < 1$  (кривая B<sub>2</sub>),  $\omega_0 = 1,65/N^{1/4}$

### 3.2 Осцилляции незатухающего тока в квантовых точках и кольцах в магнитном поле

Электронные свойства двумерных квантовых колец и точек в перпендикулярном магнитном поле будем изучать с помощью ТФП. Магнитное поле берется таким, что все электроны являются спин-поляризованными. Полная энергия для электронов в квантовом кольце запишется в виде (3.1).

В качестве внешнего потенциала возьмем параболический удерживающий потенциал с радиусом кольца  $r_0$ :

$$V_{ext}(r) = \frac{\omega_0^2}{4}(r - r_0)^2. \quad (3.11)$$

Незатухающий ток представляет собой сумму парамагнитного и диамагнитного токов:

$$I = -\sum_m \int \frac{2m}{r} \psi_m^2(r) dr + \frac{N}{2\pi L^2} \quad (3.12)$$

Уравнения Кона-Шэма (3.9)-(3.10) с внешним потенциалом (3.11) решались численно [114]. Вычисления проводились для различных наборов значений  $m$ , а за основное состояние для заданного значения  $M$  принималось состояние с минимальной энергией. На рисунке 3.11 представлены результаты вычисленной энергии электронов (для GaAs квантовых колец) в зависимости от полного углового момента электронов. Видно, что магические числа имеют период  $\Delta M = N$  и основное и метастабильные состояния возможны только при

$$M = M_0 + pN, \quad (3.13)$$

где  $M_0 = N(N-1)/2$ ,  $p = 0, 1, 2, \dots$

Отметим, что с увеличением радиуса кольца основное состояние сдвигается в сторону больших  $M$ . Это связано с тем, что в основном состоянии электроны локализованы вблизи  $r_0$ . Отметим, что период магических чисел для квантовой точки и квантового кольца совпадает.

Наличие магических чисел приводит к квантованию полного углового момента электронов (рисунок 3.12), при этом зависимость  $M(B)$  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:

$$B_i = cM, \quad (3.14)$$

где  $c$  – константа,  $i = 1, 2, \dots$

Из выражений (3.13) и (3.14) получим для ширин плато:

$$\Delta B = \frac{2B_1}{N+1} \quad (3.15)$$

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

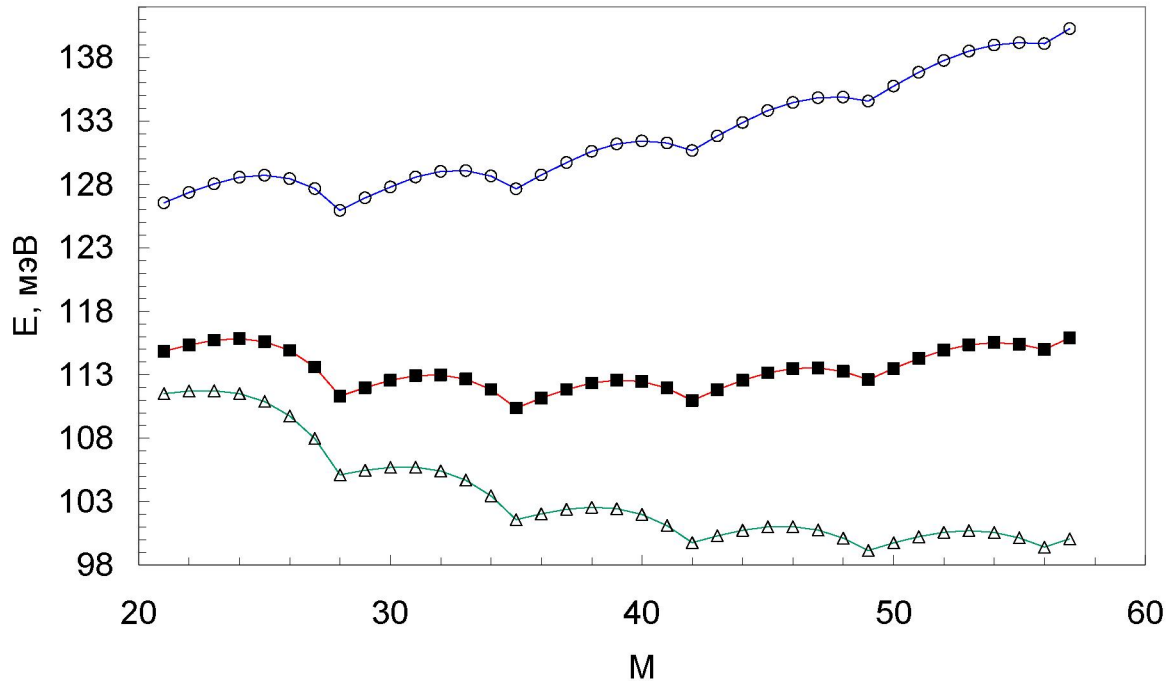


Рисунок 3.11 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N=7$ ,  $B=6,5$  Т,  $\hbar\omega_0=4$  мэВ):  $\circ$  —  $r_0 = 10$  нм;  $\blacksquare$  —  $r_0 = 20$  нм;  $\triangle$  —  $r_0 = 30$  нм. Точки соединены линиями для наглядности

С изменением величины углового момента электронов следует ожидать изменение незатухающего тока в квантовом кольце. Результаты вычислений приведены на рисунке 3.13. Первые линейные отрезки на кривых рисунка 3.13 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 (3.15) и возрастает с увеличением радиуса кольца. Видно, что амплитуда осцилляций слабо зависит от радиуса кольца. Вблизи максимумов и



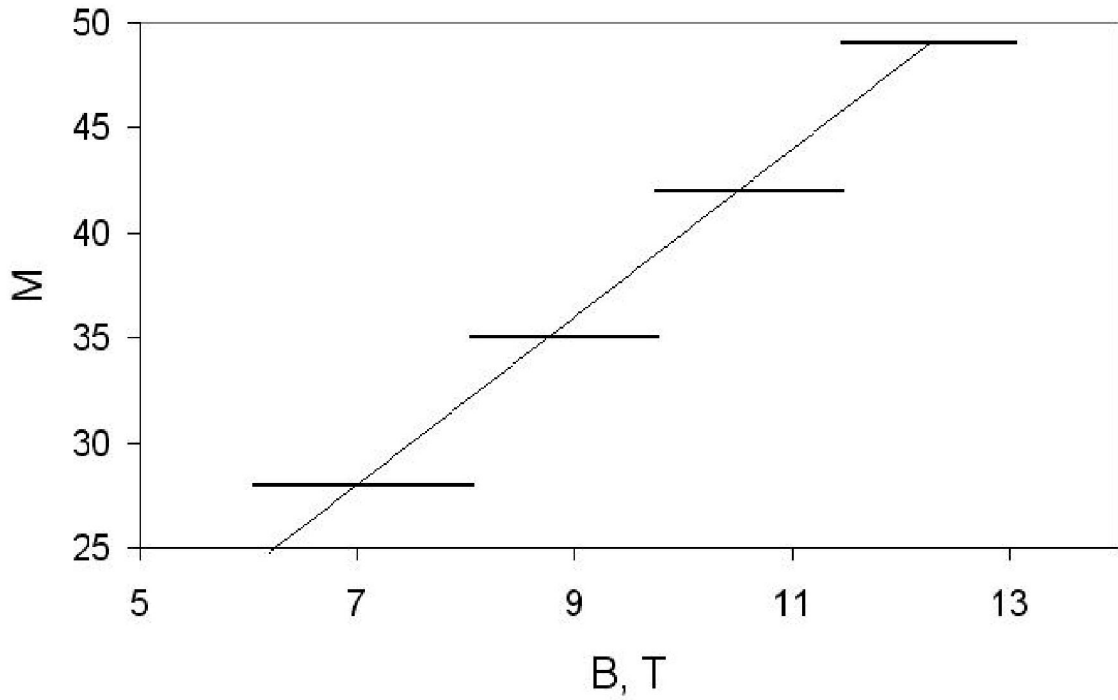


Рисунок 3.12 – Зависимость полного углового момента электронов от магнитного поля ( $N=7$ ,  $\hbar\omega_0=4$  мэВ,  $r_0=1$ ). Прямая линия соответствует формуле (3.14)

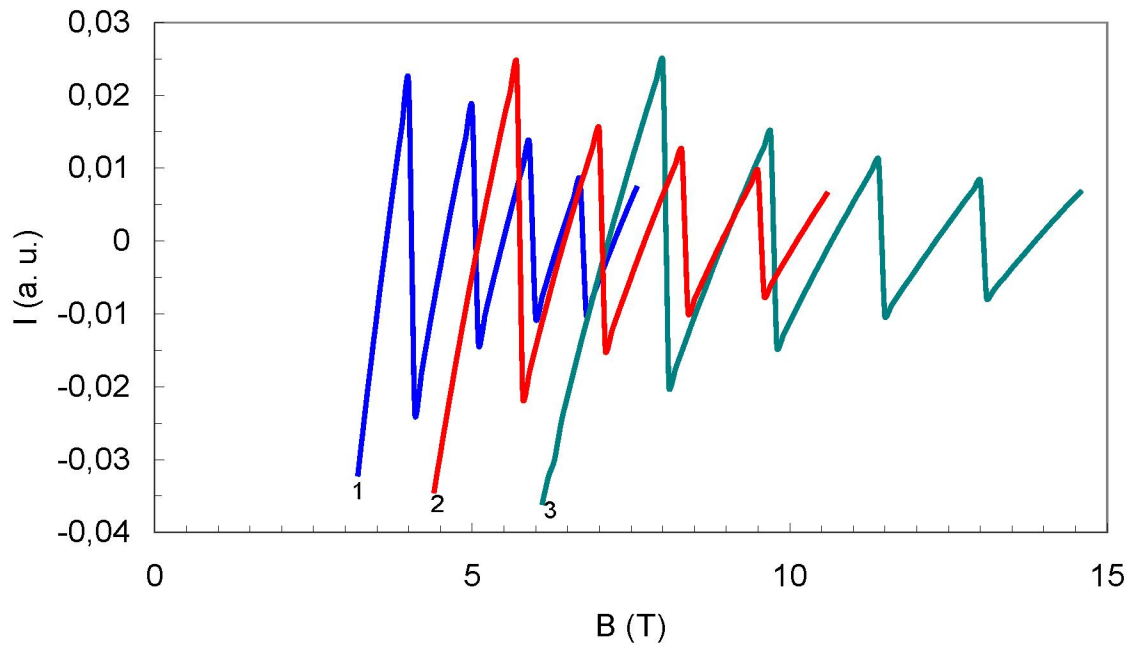


Рисунок 3.13 – Зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля ( $N=7$ ,  $\hbar\omega_0=4$  мэВ): кривая 1 —  $r_0=3$ , кривая 2 —  $r_0=2$ , кривая 3 —  $r_0=1$

минимумов незатухающего тока энергетическая 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  $\omega_0$  ( $N < 14$ , величина  $\hbar\omega_0$  бралась 4, 6, 8 мэВ) также показали, что период осцилляций незатухающего тока хорошо описывается формулой (3.15). В этих вычислениях предполагалось, что электроны имеют компактную конфигурацию.

Представляет большой интерес изучение влияния электрон-электронного взаимодействия на свойства незатухающего тока в квантовых кольцах. Для этого были проведены вычисления без учета взаимодействия электронов. В этом случае в уравнениях Кона-Шэма  $V_{eff}(r) = V_{ext}(r)$ . Результаты вычислений для таких же параметров, как и на рисунке 3.13, приведены на рисунке 3.14.

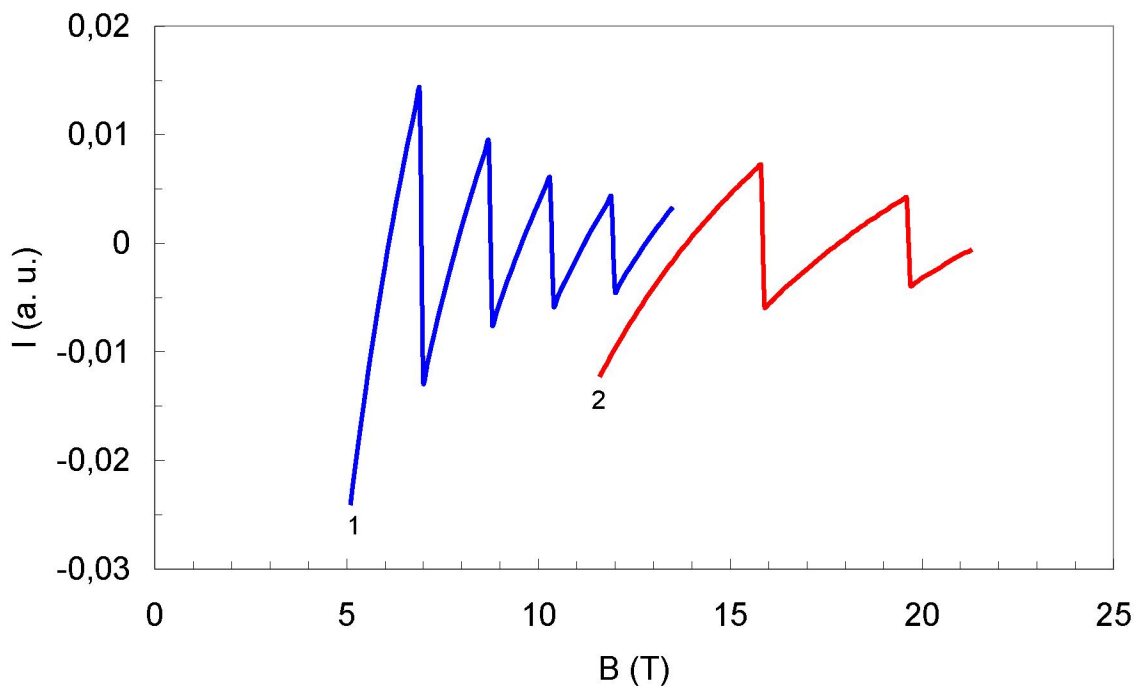


Рисунок 3.14 – Зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля без учета взаимодействия электронов ( $N=7$ ,  $\hbar\omega_0 = 4$  мэВ): кривая 1 —  $r_0 = 3$ , кривая 2 —  $r_0 = 2$

Сравнение результатов, представленных на рисунках 3.13 и 3.14, показывают сильное влияние электрон-электронного взаимодействия на характеристики незатухающего тока в зависимости от магнитного поля. Без учета электрон-электронного взаимодействия амплитуда незатухающего тока уменьшается примерно в 2 раза, но наиболее важное различие связано с увеличением периода осцилляций и со смещением основного состояния с данным  $M$  в сторону больших магнитных полей. Так, при  $r_0 = 3$  значение  $B_1$  на рисунке 3.14 в 1,7 раза больше, чем на рисунке 3.13. Еще большее различие в значениях  $B_1$  и периодах осцилляции наблюдается при уменьшении  $r_0$ . Так при  $r_0 = 2$  и  $r_0 = 1$  значения  $B_1 = 5,1$  Т и  $B_1 = 7,1$  Т, соответственно (рисунок 3.13), а в отсутствии взаимодействия  $B_1 = 13,7$  Т (рисунок 3.14) и  $B_1 = 56$  Т (не показано на рисунке 3.14).

Оценим величину  $B_1$  для невзаимодействующих электронов. В магнитном поле волновая функция электрона с угловым моментом  $m$  имеет максимум при  $r_m = (2m)^{1/2}L$ . Для достижения минимума энергии электроны должны локализоваться вблизи  $r_0$ , и все электроны должны иметь компактную конфигурацию. Для состояния с  $M = M_0 + N$  электроны имеют конфигурацию  $(1, 2, \dots, N)$  и энергия электронов будет иметь минимум при  $(N)^{1/2}L \approx r_0$ . Из последнего выражения получаем:

$$B_1 \approx \frac{6,9N}{r_0^2} . \quad (3.16)$$

Для периода осцилляций получим:

$$\Delta B \approx \frac{2B_1}{N} . \quad (3.17)$$

Отметим, что значения  $B_1$  и  $\Delta B$ , вычисленные по формулам (3.16) и (3.17), неплохо согласуются с численными результатами, представленными на рисунке 3.14. Электрон-электронное взаимодействие приводит к смещению профиля плотности электронов относительно минимума удерживающего потенциала.

Следует ожидать, что при повышении плотности электронов кулоновское взаимодействие играет меньшую роль. Для изучения этого явления были проведены вычисления с разными напряженностями удерживающего потенциала. На рисунках 3.15 и 3.16 приведены результаты этих вычислений. Без учета взаимодействия электронов (рисунок 3.16) период осцилляции практически не зависит от  $\omega_0$  и напряженность удерживающего потенциала влияет только на амплитуду незатухающего тока. С учетом взаимодействия электронов наблюдается изменение периода и амплитуды незатухающего тока, в зависимости от частоты удерживающего потенциала. Однако, при достаточно высоких значениях  $\omega_0$  кривые зависимости  $I(B)$  в обоих случаях близки к друг другу (кривая 3 на рисунке 3.15 и кривая 2 на рисунке 3.16). Таким образом, при высоких  $\omega_0$  (высокие плотности электронов) влияние кулоновского взаимодействия на характеристики незатухающих токов уменьшается.

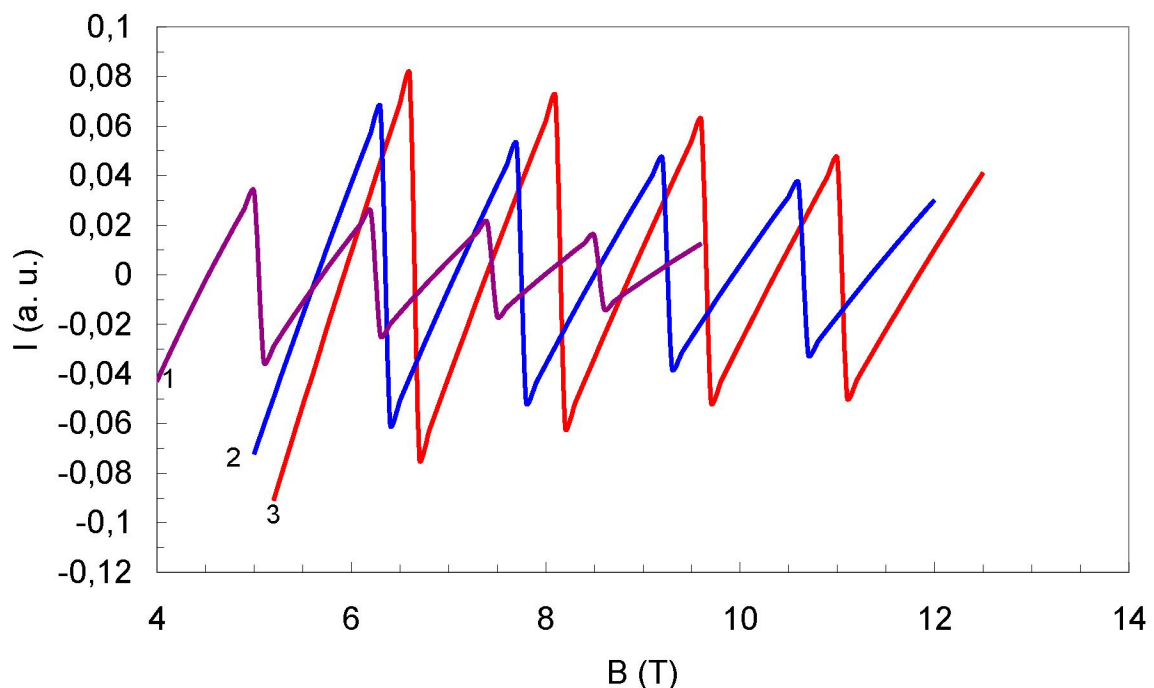


Рисунок 3.15 – Зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля ( $N=7$ ,  $r_0=3$ ): кривая 1 —  $\hbar\omega_0=6$  мэВ, кривая 2 —  $\hbar\omega_0=12$  мэВ, кривая 3 —  $\hbar\omega_0=16$  мэВ

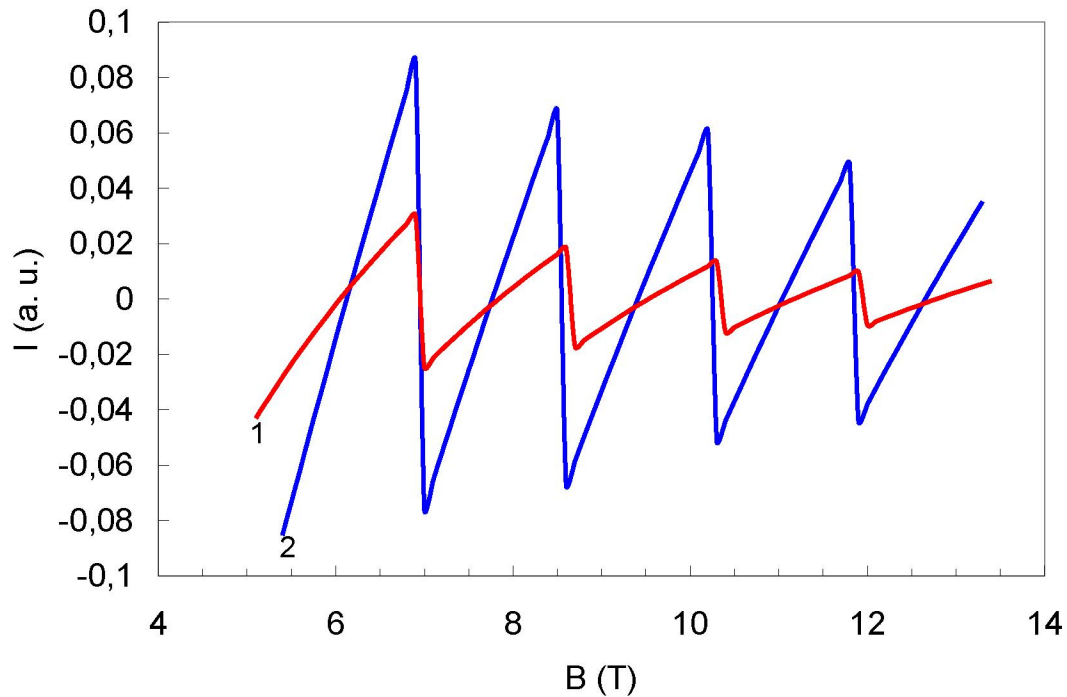


Рисунок 3.16 – Зависимость незатухающего тока в квантовом кольце от магнитного поля без взаимодействия электронов ( $N=7$ ,  $r_0=3$ ): кривая 1 —  $\hbar\omega_0=6$  мэВ, кривая 2 —  $\hbar\omega_0=16$  мэВ

Отметим, что в большинстве работ осцилляции незатухающего тока изучаются в квантовых кольцах, в которых в отличие от квантовых точек осцилляции возможны даже без учета межэлектронного взаимодействия. В квантовых точках без учета электрон-электронного взаимодействия осцилляции незатухающего тока невозможны. Нами в работах [115, 116] показано, что осцилляции незатухающего тока могут возникать в квантовых точках. Причина этого явления связана с электрон-электронным взаимодействием. При изменении магнитного поля именно электрон-электронное взаимодействие приводит к изменению угловых моментов электронов и как следствие к осцилляциям незатухающего тока в квантовых точках.

Для вычисления величины незатухающего тока используем выражение (3.12). Считаем, что внешний потенциал  $V_{ext}(r)$  создается положительно заряженным фоном плотности  $n_p$ , не равным нулю при  $r < R$ .

Для квантовой точки с  $N$  электронами величина  $R$  находится из условия электронейтральности  $n_p \pi R^2 = N$ .

Как показано в разделе 3.1 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.

Наличие магических чисел приводит к квантованию полного углового момента электронов, при этом зависимость  $M(B)$  представляет собой серию плато углового момента электронов, разделенных высотой  $N$ . С изменением величины углового момента электронов следует ожидать изменение незатухающего тока в квантовой точке. Результаты численных решений уравнений Кона-Шэма для GaAs квантовой точки с  $N=40$  и  $N=9$  приведены на рисунке 3.17. Первые линейные отрезки на рисунке 3.17 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 3.17, период осцилляций незатухающего тока неплохо описывается формулой (3.15).

В квантовых точках в энергии двумерных электронов появляется щель, благодаря которой незатухающий ток может распространяться бездиссипативно даже в относительно «грязных» полупроводниках. Вблизи максимумов и минимумов незатухающего тока энергетическая щель близка к нулю, поэтому учет примесного потенциала и (или) температуры приведет к сглаживанию осцилляций в этих точках.

Считая, что выражение (3.14) верно при  $M=M_0$ , получим для периода осцилляций незатухающего тока:

$$\Delta B = \frac{2B_0}{N-1}, \quad (3.18)$$

где  $B_0$  середина плато при  $M=M_0$ .

Для макроскопической системы при  $M = M_0$  фактор заполнения  $\nu = 1$ , поэтому из выражения (3.18) для изменения магнитного потока через квантовую точку  $\Delta\Phi = \Delta B\pi R^2$  получаем:

$$\Delta\Phi = \frac{2N}{N-1}\Phi_0, \quad (3.19)$$

где  $\Phi_0 = h/e$ .

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.

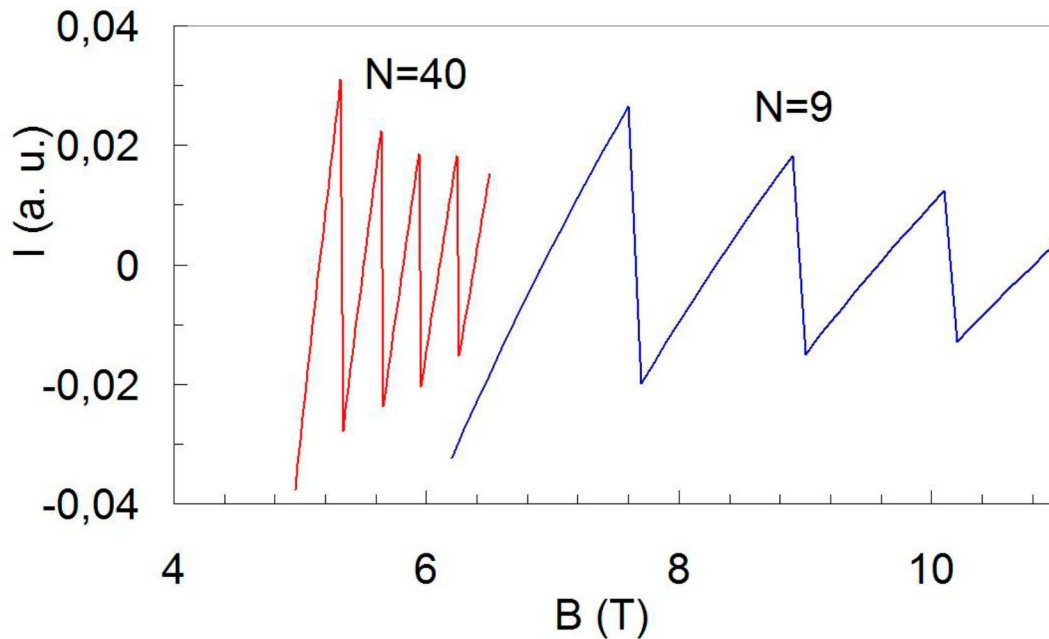


Рисунок 3.17 – Зависимость незатухающего тока в квантовых точках с  $N=9$  и 40 от магнитного поля ( $n_p = 10^{11} \text{ см}^{-2}$ )

Выражения для периода осцилляций незатухающего тока (3.14), (3.18) и (3.19) получены для периода магических чисел  $\Delta M = N$ . Как показано в разделе 3.1, возможны и другие периоды магических чисел  $\Delta M = N - k$ . Для такого набора магических чисел период осцилляций незатухающего тока будет отличаться от выражений (3.14), (3.18) и (3.19).

### 3.3 Нелинейное экранирование и переход металл-диэлектрик в двумерном электронном газе

В работах [54, 55] показано, что в кремниевых МОП структурах при низких плотностях двумерного электронного газа происходит переход металл-диэлектрик (см. обзоры [56-57]).

Для объяснения этого явления исследуем влияние заряженной примеси на свойства двумерного электронного газа [117, 118]. Экранирование заряженной примеси электронами имеет важное значение для изучения транспортных свойств полупроводниковых структур. Особый интерес представляет изучение экранирования в двумерных системах. В двумерном случае любой притягивающий потенциал имеет по крайней мере одно связанное состояние, в отличие от трехмерного случая. Для решения задачи экранирования заряженной примеси двумерными электронами использовались метод Томаса-Ферми [119], метод RPA [120, 121], приближение Хартри [122] и другие простые методы. Однако эти вычисления не являются полностью самосогласованными и не всегда учитывают коллективные свойства электронов.

Самосогласованные расчеты с использованием теории функционала плотности выполнены в работах [123, 124]. В этих работах численно решались уравнения Кона-Шэма для двумерных электронов с различной плотностью без магнитного поля. Показано, что связанное состояние электрона имеет место даже в пределе высокой плотности. На рисунке 3.18 показаны профили плотности двумерных электронов для  $r_s = 1/(\pi n_0)^{1/2} = 10$  при экранировании положительно-заряженной ( $z_0 = 1$ ) и отрицательно-заряженной примеси ( $z_0 = -1$ ) [124].

Для изучения нелинейных экранирующих свойств двумерного электронного газа в перпендикулярном магнитном поле будем также использовать теорию функционала плотности с учетом обменного взаимодействия в локальном приближении. Отличие нашего подхода от стандартного состоит в том, что в функционале плотности мы исключаем



самодействие электронов [113]. Таким образом, электроны движутся не в среднем поле, а эффективный потенциал для каждого электрона индивидуален. Магнитное поле берется таким, что все электроны являются спин-поляризованными.

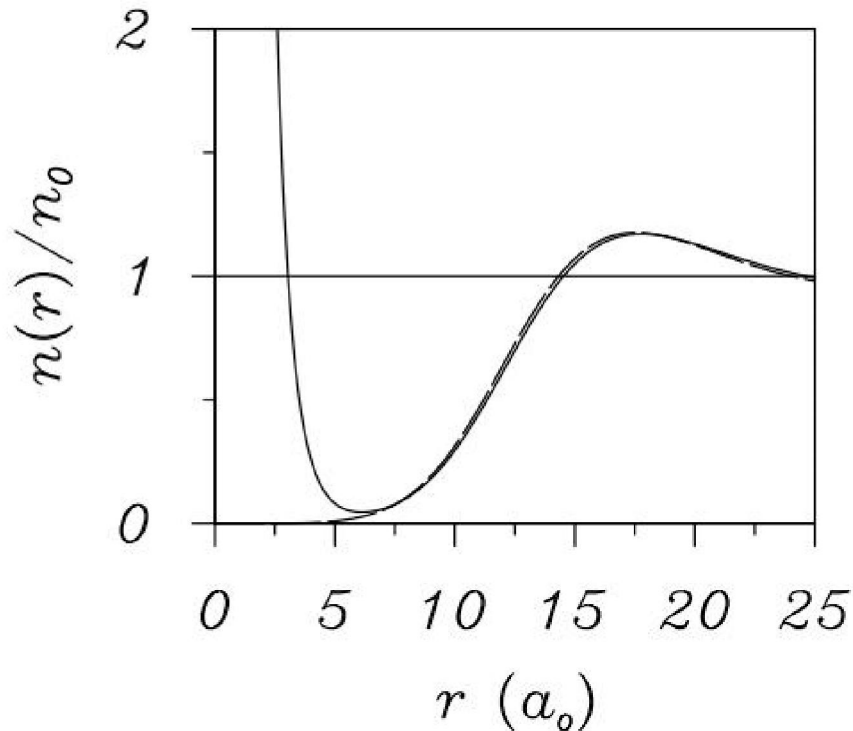


Рисунок 3.18 — Зависимость нормированной двумерной плотности электронов от расстояния до примеси для  $r_s = 10$ . Сплошная линия для положительно-заряженной примеси, штриховая — для отрицательно-заряженной примеси. Рисунок взят из работы [124]

Для двумерных электронов в сильном магнитном поле уравнения Кона-Шэма имеют вид (3.9)-(3.10). Внешний потенциал  $V_{ext}(r)$  создается примесью с зарядом  $z_0$  и положительно заряженным фоном плотности  $n_p$ , при этом плотность двумерного электронного газа вдали от примеси  $N_e = n_p$ .

Из-за бесконечного вырождения уровня Ландау для бесконечной системы задача может быть решена только для целочисленных значений

фактора заполнения  $\nu = 2\pi n_p L^2 = 1$ . В этом случае выражение для плотности электронов запишется в виде:

$$n(r) = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^2(r) . \quad (3.20)$$

Уравнения Кона-Шэма решались для электронов заселяющих состояние с угловым моментом  $0 \leq m \leq m_0$ , а для остальных электронов брались невозмущенные волновые функции:

$$\psi_m^{(0)}(r) = \frac{1}{(2\pi 2^m m!)^{1/2}} \frac{r^m}{L^{m+1}} e^{-r^2/4L^2} \quad (3.21)$$

Таким образом, для численных расчетов использовалось следующее выражение для плотности электронов:

$$n(r) = \sum_{m=0}^{m_0} \psi_m^2(r) + \sum_{m=m_0+1}^{\infty} \psi_m^{(0)2}(r) . \quad (3.22)$$

Вычисления проводились для полупроводника GaAs для которого  $k = 12.4$ ,  $m_e = 0.067m_{el}$  ( $m_{el}$  – масса свободного электрона) На рисунке 3.19 приведены результаты расчетов при  $z_0 = 1$  и  $m_0 = 15$  для различных

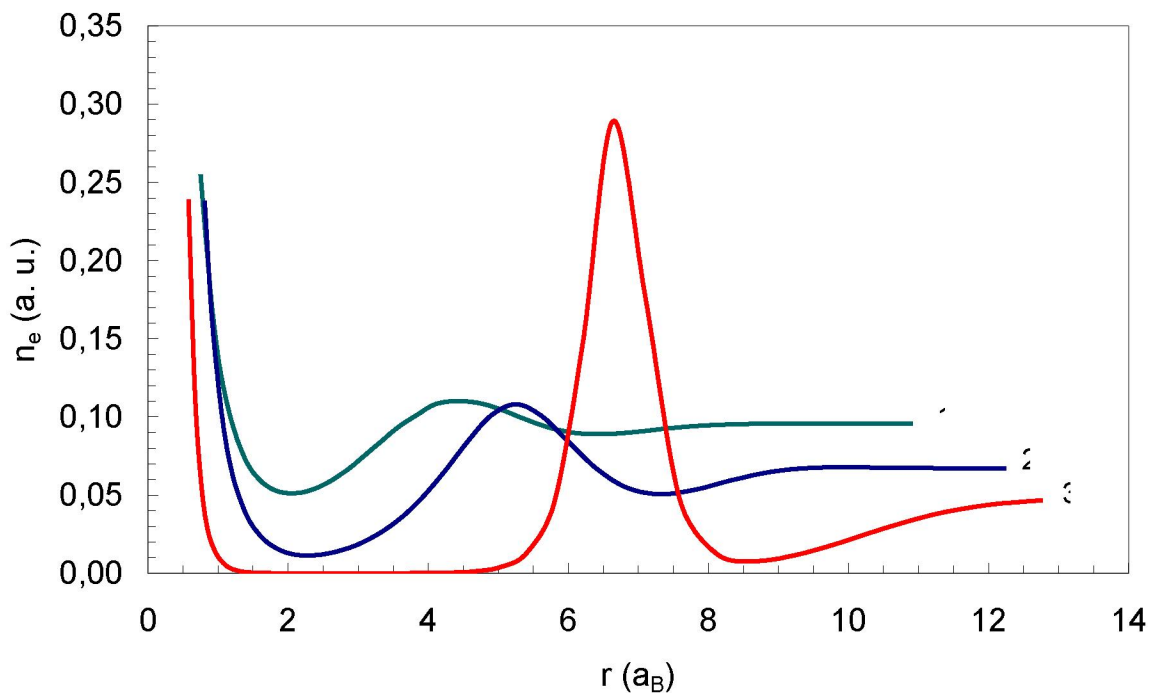


Рисунок 3.19 – Профили плотности электронов при  $N_e = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  (кривая 1),  $N_e = 6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (кривая 2),  $N_e = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (кривая 3)

плотностей двумерного электронного газа  $N_e = n_p$ . Видно, что электронная плотность имеет осцилляции, подобные фриделевским осцилляциям, а при уменьшении плотности  $N_e$  вклад обменного взаимодействия становится более существенным и амплитуда осцилляций возрастает. При плотности  $N_e = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  существует область с нулевой плотностью электронов, причем на примеси локализуются два электрона с  $m = 0$  и  $m = 1$ , волновые функции которых не перекрываются с волновыми функциями других электронов.

Эти результаты показывают, что электроны могут локализоваться на примеси и не давать вклад в проводимость только при низких плотностях двумерного электронного газа или при высоких плотностях примесей. В других полупроводниках при низких плотностях двумерного электронного газа (для кремния  $N_e < 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) два электрона также локализуются на примеси. Поэтому переход металл-диэлектрик будет наблюдаться в полупроводниках с двумерной концентрацией примесей  $N_i$  в два раза ниже, чем концентрация электронов. Таким образом, при факторе заполнения  $\nu=1$  переход металл-диэлектрик будет происходить при отношении  $N_i/N_e = 0.5$ , которое является универсальным для всех полупроводников. Экспериментальные данные [61], полученные для кремния, дают  $N_i/N_e = 0.43$ , что хорошо согласуется с результатами наших вычислений.

На рисунке 3.20 показаны профили электростатического потенциала (первое слагаемое в выражении (3.10)) при различных значениях двумерных плотностей электронов. При плотности  $N_e^c = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  электростатический потенциал имеет достаточно широкий минимум, поэтому при увеличении  $\nu$  электроны со второго уровня Ландау будут локализоваться вблизи этого минимума, и отношение  $N_i/N_e^c$  будет уменьшаться. Это будет происходить, пока все минимумы не заполнятся (при  $\nu = 1.5$ ) и в этом случае  $N_i/N_e^c = 1/3$ . Далее при  $\nu > 1.5$  электроны

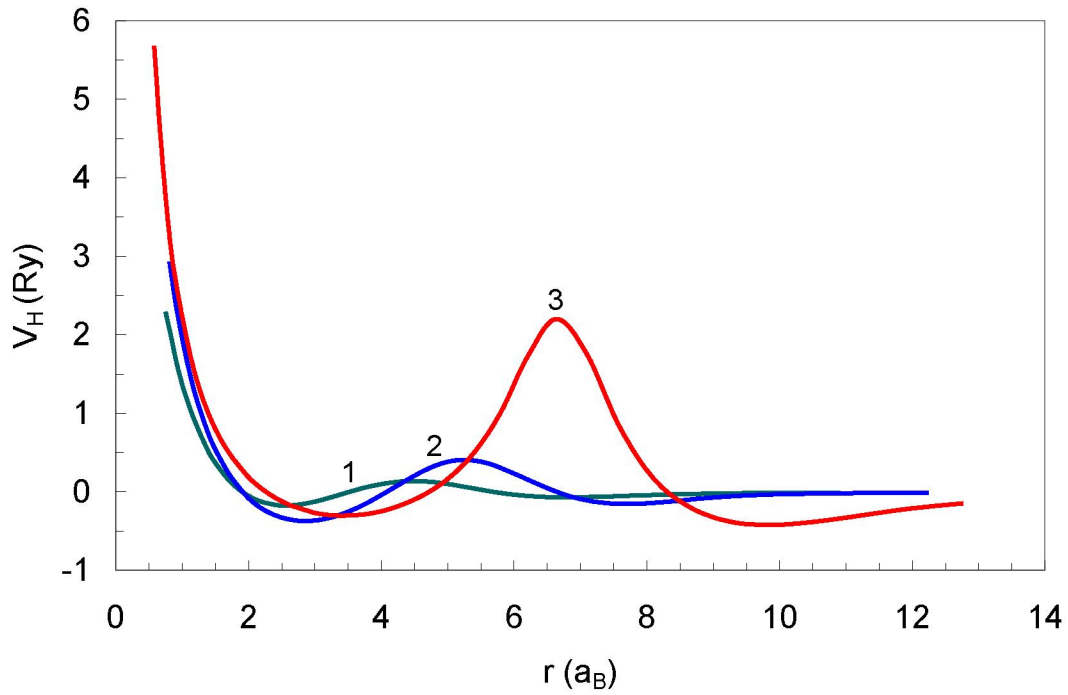


Рисунок 3.20 – Профили электростатического потенциала при  $N_e = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  (кривая 1),  $N_e = 6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (кривая 2),  $N_e = 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (кривая 3)

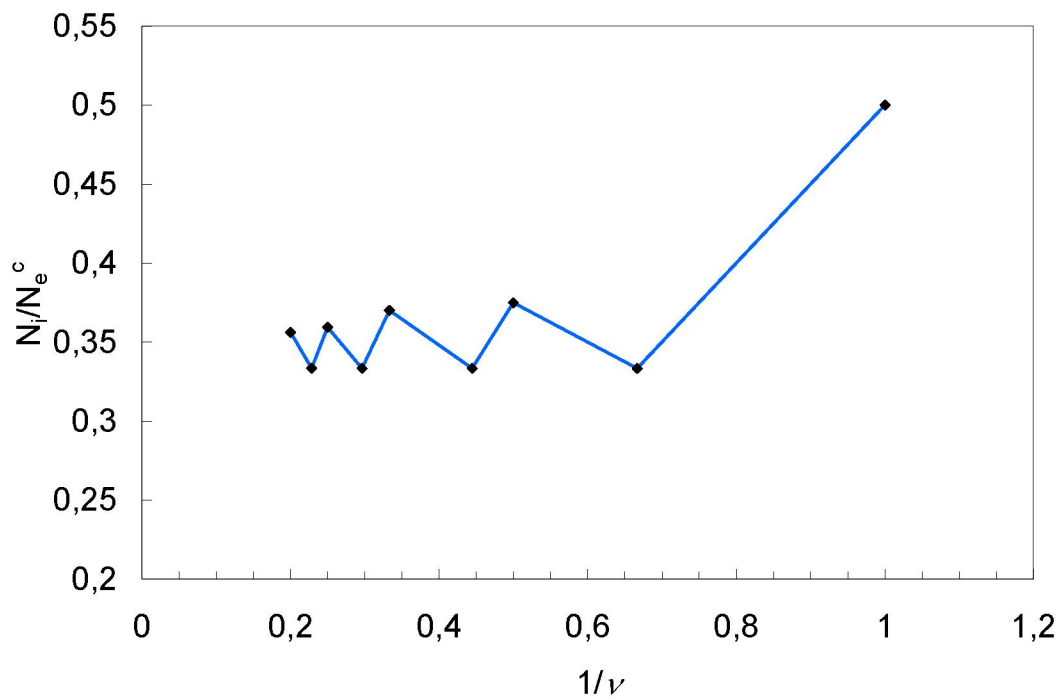


Рисунок 3.21 – Фазовая диаграмма перехода металл-диэлектрик в двумерном электронном газе

второго уровня будут локализоваться на примеси попарно (как и электроны первого уровня), а значит отношение  $N_i/N_e^c$  будет увеличиваться при увеличении  $\nu$  от 1.5 до 2. Подобная ситуация будет происходить и при  $\nu > 2$ . В общем случае доля электронов, локализованных вблизи минимума потенциала, выражается соотношением  $a_{n+1} = (1 - a_n)/2$ , где  $a_1 = 0$ ,  $n$  – номер уровня Ландау. Согласно этим результатам на рисунке 3.21 представлена фазовая диаграмма перехода металл-диэлектрик в двумерном электронном газе. Отметим, что построенная фазовая диаграмма качественно соответствует результатам экспериментальной работы [61].

### 3.4 Основные выводы

Теоретическое исследование электронной структуры квантовых точек в сильном магнитном поле проводилось с помощью теории функционала плотности. Был создан новый эффективный алгоритм численного решения системы нелинейных уравнений Кона-Шэма для  $N$  двумерных электронов в перпендикулярном магнитном поле. Самосогласованно вычислены профиль электронной плотности, потенциалы (как полный, так и электростатический), волновые функции и уровни энергии электронов.

Проведено сравнение полученных результатов с точными результатами. Вычисленные значения энергии оказались близки к точным значениям. Самое главное, что получены такие же магические числа и периоды  $\Delta M = N$  и  $\Delta M = N - 1$ , как и в точных вычислениях. В одночастичном приближении это означает, что для  $\Delta M = N$  все электроны имеют компактную конфигурацию, а для  $\Delta M = N - 1$  один электрон находится в центре КТ, а остальные распределены по кольцу.

Вычислена энергетическая щель (разность энергий между основным и ближайшим по энергии метастабильным состоянием). Для GaAs квантовой точки величина энергетической щели составляет около одного градуса Кельвина.

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.

Показано, что электронная плотность является сильно неоднородной. Такая неоднородность проявляется в квантовых точках, в которых электроны не имеют компактную конфигурацию. При низких средних плотностях электронов неоднородность электронной плотности проявляется даже при малых значениях отношения  $M_0/M$ .

Исследовано влияние заряженной примеси на электронную структуру квантовых точек и определено, что примесь изменяет основное состояние и частично разрушает набор магических чисел для полного углового момента электронов. Положительно заряженная примесь сдвигает основное состояние в сторону меньшего углового момента и преобладает период  $\Delta M = N - 2$ . В случае присутствия отрицательно заряженной примеси основное состояние сдвигается в сторону большего  $M$  и существует только период  $\Delta M = N$ , т. е. все электроны имеют компактную конфигурацию.

В координатах магнитное поле – число электронов построена фазовая диаграмма перехода от спин-поляризованного состояния электронов с компактной конфигурацией в неполяризованное состояние и в состояние с фактором заполнения уровня Ландау  $\nu < 1$ .

Были проведены расчеты с большим числом электронов в квантовой точке при факторе заполнения уровня Ландау  $\nu = 1$ . При экранировании примеси двумерными электронами профиль электронной плотности имеет осцилляционный вид, причем период осцилляций  $\approx \pi L$  ( $L$  – магнитная длина). При уменьшении напряженности удерживающего потенциала амплитуда этих осцилляций возрастает, что объясняется увеличением роли

электрон-электронного взаимодействия при низких средних плотностях электронов.

Вычислена величина незатухающего тока в квантовом кольце в зависимости от магнитного поля. Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока. Показано, что с увеличением плотности электронов влияние кулоновского взаимодействия на характеристики незатухающих токов уменьшается.

Показана возможность возникновения осцилляций незатухающего тока при изменении магнитного поля в двумерных квантовых точках. Природа этих осцилляций связана с электрон-электронным взаимодействием. Отметим, что в квантовых кольцах осцилляции незатухающего тока возникают даже без учета взаимодействия между электронами (например, квантовое кольцо с одним электроном). Получена эмпирическая формула для периода осцилляций незатухающего тока. Период осцилляций по магнитному полю уменьшается с увеличением  $N$ , однако период по магнитному потоку через квантовую точку слабо зависит от  $N$ .

Для фактора заполнения уровня Ландау  $\nu = 1$  при низких плотностях электронов на положительно заряженной примеси локализуются два электрона, волновые функции которых практически не перекрываются с волновыми функциями других электронов. В этом случае переход металл-диэлектрик будет наблюдаться в двумерном слое с концентрацией примесей  $N_i$  в два раза ниже, чем концентрация электронов. Согласно этому результату в координатах  $N_i/N_e - 1/\nu$  построена фазовая диаграмма перехода металл-диэлектрик в двумерном электронном газе.

## Глава 4

### Электронная структура вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле

#### 4.1 Новые серии магических чисел для полного углового момента электронов и осцилляции незатухающего тока в вертикально-связанных квантовых точках в магнитном поле

Последние достижения в технологии изготовления полупроводниковых структур позволяют создавать вертикально-связанные квантовые точки. В настоящее время свойства вертикально-связанных квантовых точек активно изучаются как экспериментально, так и теоретически [62-67, 125-137]. В настоящей главе будет исследована электронная структура двойных вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле. На рисунке 4.1 приведено схематическое изображение двойной вертикально-связанной квантовой точки. 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  $\Delta_{sas}$  – туннельная щель. Для двойных квантовых точек одноэлектронные состояния разделяются на симметричные и антисимметричные за счет межслойного туннелирования (рисунок 4.1 (справа)). Величина туннельной щели может регулироваться расстоянием  $d$  и (или) удерживающими потенциалами.

В большинстве работ при вычислениях квантовые точки считаются двумерными и туннельная щель используется как параметр. Как для одиночных квантовых точек, так и для двойных квантовых точек наиболее впечатляющие результаты получены с использованием численного решения многочастичного уравнения Шредингера [125-127]. На рисунке



4.2 приведены результаты такого решения для трех электронов [127]. При  $\Delta_{sas} = 0,2$  мэВ получен набор магических чисел  $L = 5, 7, 9, 12, 15$  (указаны стрелками слева на рисунке 4.2). Набор магических чисел с периодом равным три ( $L = 9, 12, 15$ ) означает, что электроны занимают только симметричные состояния. Такой же набор магических чисел получен в главе 3 для одиночной квантовой точки. При  $L = 5$  и  $L = 7$  заселены и антисимметричные состояния. Этот результат наглядно продемонстрирован на рисунке 4.2 (справа). Плотность электронов при  $L = 5$  имеет максимум при  $r = 0$ , причем значение плотности в максимуме значительно выше среднего значения плотности, а это значит что антисимметричное состояние заселено.

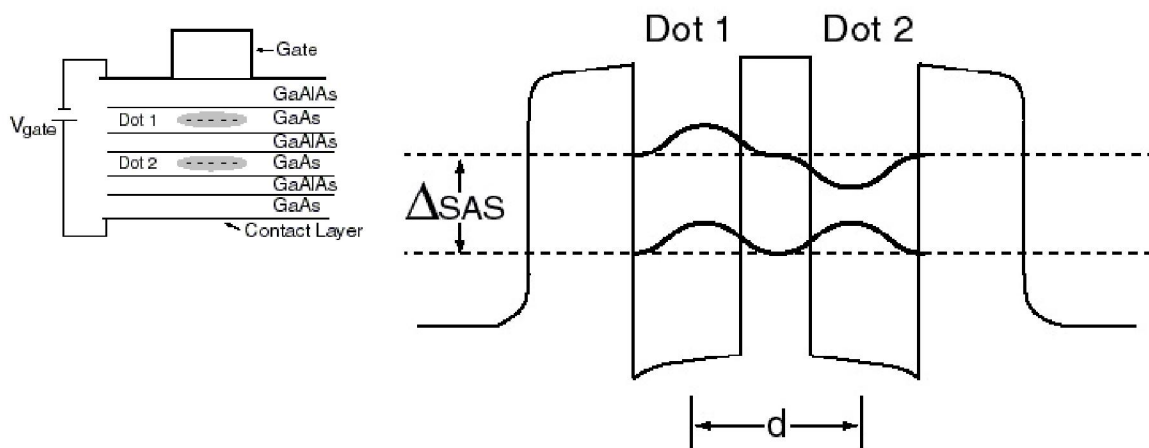


Рисунок 4.1 – Схематическое изображение двойной вертикально-связанной квантовой точки (слева). Потенциалы и волновые функции электронов в направлении, перпендикулярном к слоям в двойной квантовой точке (справа). Рисунок взят из работы [127]

При сильной связи между квантовыми точками ( $\Delta_{sas} = 0,6$  мэВ) заселенными оказываются только симметричные состояния и магические числа  $L = 6, 9, 12, 15$  (указаны стрелками слева на рисунке 4.2), которые совпадают с магическими числами для отдельной квантовой точки.

В данном разделе исследуются электронные свойства двух двумерных вертикально-связанных квантовых точек в перпендикулярном магнитном поле с помощью теории функционала плотности. В дальнейшем используется атомная система единиц. Вычисления проводятся для квантовой точки GaAs, для которой  $a_B = 9,8$  нм,  $Ry = 5,9$  мэВ.

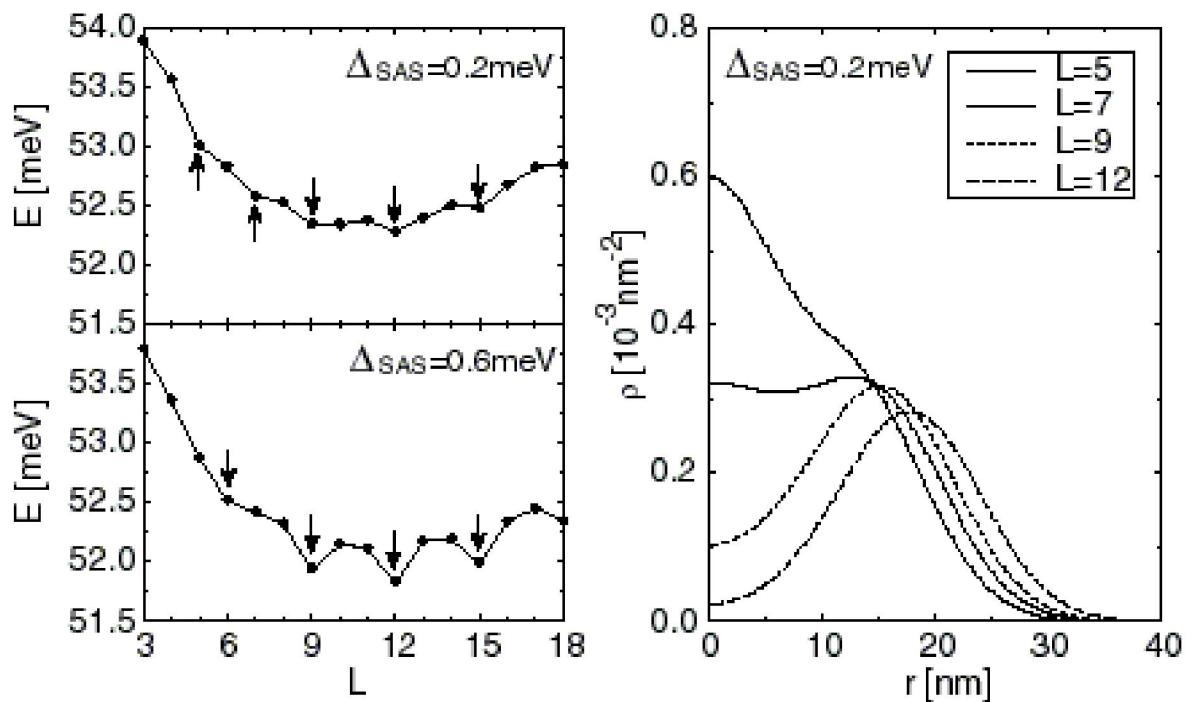


Рисунок 4.2 – Слева: энергия основного состояния в зависимости от суммарного углового момента электронов  $L$  в вертикально связанных точках с тремя спин-поляризованные электроны для  $\Delta_{sas} = 0,2$  ( $0,6$ ) мэВ при  $B = 15$ ,  $\hbar\omega_0 = 3$  мэВ,  $d = 20$  нм. Стрелки указывают положения минимумов. Справа: плотность заряда на электрон для каждого слоя при  $L = 5, 7$  и  $L = 9, 12$ . Рисунок взят из работы [127].

Будем изучать электронную структуру двойных вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле с помощью ТФП [138]. Для двух одинаковых квантовых точек полная энергия двумерных электронов запишется в следующем виде

$$E = T + \int (V_c(r,0) + V_c(r,d))n(r)dr + 2 \int \varepsilon_x(n)n(r)dr - \sum_m \int (2\varepsilon_x(n_m) + V_{c,m}(r,0) + V_{c,m}(r,d))n_m(r)dr + 2 \int V(r)n(r)dr - \Delta_{sas}(N_s - N_a)/2, \quad (4.1)$$

где  $T$  – кинетическая энергия невзаимодействующих электронов в магнитном поле  $B$ , которое задается векторным потенциалом  $A = B(-y/2, x/2, 0)$ ,  $\Delta_{sas}$  – величина туннельной щели,  $N_s$  ( $N_a$ ) – число электронов занимающих уровень энергии в подзоне симметричного (антисимметричного) состояния.

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

где  $d$  – расстояние между квантовыми точками.

В выражении (4.1) исключается самодействие электронов, а для учета многочастичных эффектов используется только обменная энергия, которая берется в приближении локальной плотности. Для спин-поляризованных электронов обменная энергия на один электрон имеет вид

$$\varepsilon_x(n) = \alpha n(r), \quad (4.2)$$

где  $\alpha = -\sqrt{2\pi}\pi L(1 + f(d))$ ,  $L$  – магнитная длина.

Введение параметра  $f$  связано с тем, что вид выражения для обменной энергии неизвестен. Значение  $f(d) \leq 1$  и в предельных случаях  $f(0) = 1$  (одна квантовая точка) и  $f(\infty) = 0$  (две независимые квантовые точки).

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, из выражения (4.1) получаем уравнения Кона-Шэма

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{4L^4} + \frac{m^2}{r^2} - \frac{m}{L^2} + V_{eff}(r) \right\} \psi_m(r) = E_m \psi_m(r), \quad (4.3)$$

с эффективным одночастичным потенциалом:

$$V_{eff}(r) = V_c(r,0) + V_c(r,d) - V_{c,m}(r,0) - V_{c,m}(r,d) + 2\alpha(n(r) - n_m(r)) + V(r), \quad (4.5)$$

$$V(r) = \frac{\omega_0^2}{4} r^2, \quad (4.6)$$

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

Здесь в качестве внешнего потенциала  $V(r)$  взят параболический удерживающий потенциал. Были проведены расчеты с различными значениями  $f(d)$  для  $N = 3$  и 4. Сравнение с точными результатами [127] показало, что при  $f = 0$  для энергии отличие составляет около 5 процентов. В дальнейших вычислениях используется  $f = 0$ .

Результаты самосогласованных вычислений для двух вертикально-связанных квантовых точек с числом электронов  $N = 3$  показаны на рисунке 4.3. Видно, что при  $\Delta_{sas} = 0,01$  магические числа ( $M = 5, 7, 10, 13$ ) имеют период 2 и 3, который совпадает с периодом для отдельной квантовой точки с  $N=3$ . Однако природа возникновения магических чисел здесь другая и связана с заселением антисимметричного состояния. Так для состояния с  $M = 5$  минимум энергии достигается при конфигурации электронов  $m_s=1$  и 2 и  $m_a=2$ , т.е. два электрона находятся на уровне

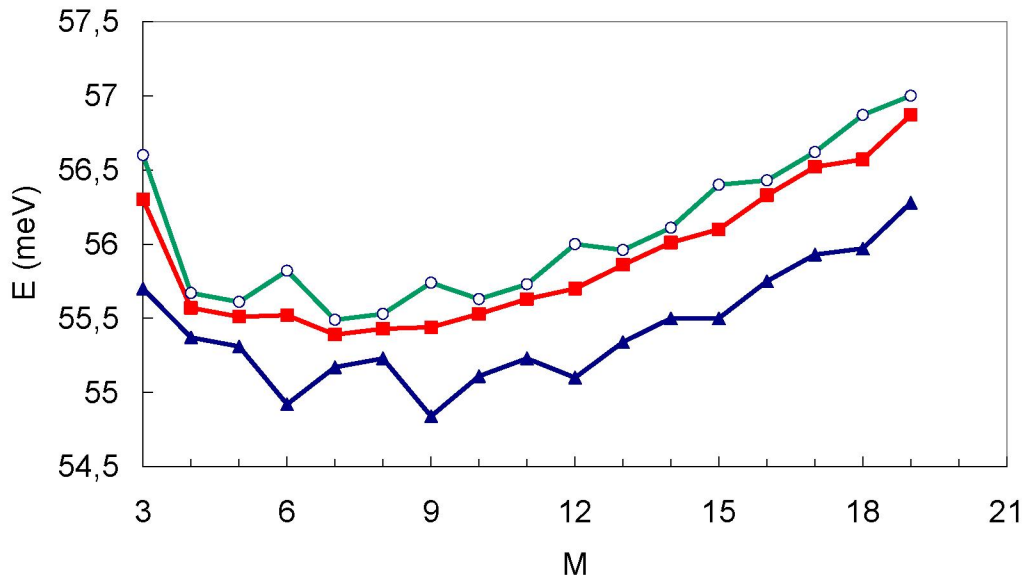


Рисунок 4.3 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N = 3$ ,  $d = 2$ ,  $B = 15$ Тл,  $\omega_0 = 0,5$ ):  $\circ$  —  $\Delta_{sas} = 0,01$ ;  $\blacksquare$  —  $\Delta_{sas} = 0,03$ ;  $\blacktriangle$  —  $\Delta_{sas} = 0,1$ . Точки соединены линиями для наглядности

энергии симметричного состояния и один электрон занимает уровень энергии антисимметричного состояния. Сравнение результатов, представленных на рисунке 4.3 ( $\Delta_{sas} = 0,03$  и  $\Delta_{sas} = 0,1$ ), с точными результатами [127] показало, что расхождение составило около 5 процентов. При увеличении величины туннельной щели появляются новые магические числа ( $M = 9, 12, 15, 18$ ), которые имеют такую же природу, как и в отдельной квантовой точке. В этом случае основное и все метастабильные состояния имеют компактную конфигурацию электронов, и все электроны в этих состояниях находятся на уровне энергии симметричного состояния.

На рисунке 4.4 приведены результаты расчетов для квантовой точки с различным числом электронов, находящихся в антисимметричном состоянии. При выполнении расчетов учитывались только состояния с компактной конфигурацией электронов (в пространстве углового момента заняты соседние состояния). Основные состояния для  $N_a = 0, 1, 2, 3, 4$  имеют энергии  $E = 24,25; 24,16; 24,01; 23,9; 23,84$ , соответственно. Таким образом, при  $\Delta_{sas} < 0,06$  основным состоянием будет состояние с  $N_a = 4$  и  $M = 43$ . При малых  $\Delta_{sas}$  период магических чисел будет равен 4 и 5, который совпадает с периодом для отдельной квантовой точки с  $N = 4$  и с  $N = 5$ . С увеличением  $\Delta_{sas}$  появляются новые серии магических чисел с периодом равным 3 и 2 (соответственно три или два электрона находятся на уровне энергии антисимметричного состояния). При больших значениях  $\Delta_{sas}$  (сильная связь между квантовыми точками) период магических чисел остается таким же, как и для отдельной квантовой точки с  $N = 9$ .

Представляет интерес исследование влияния магнитного поля на заселенность антисимметричного состояния. Результаты самосогласованных вычислений для квантовой точки с числом электронов  $N = 8$  показаны на рисунке 4.5. Вычисление проводились для различных конфигураций электронов. Найдено, что основное состояние имеет компактную конфигурацию в пространстве углового момента для

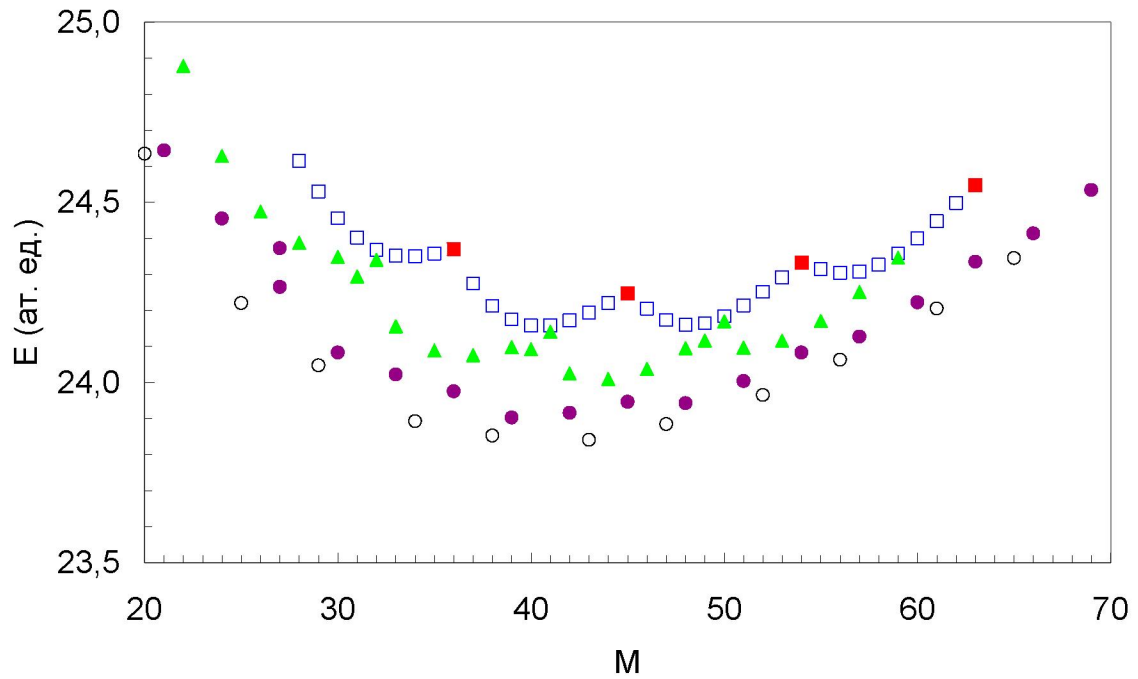


Рисунок 4.4 – Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента электронов ( $N=9$ ,  $d=2$ ,  $B=4$  Тл,  $\omega_0 = 0,33$ ,  $\Delta_{\text{sas}}=0$ ): ■ —  $N_a=0$ ; □ —  $N_a=1$ ; ▲ —  $N_a=2$ ; ● —  $N_a=3$ ; ○ —  $N_a=4$

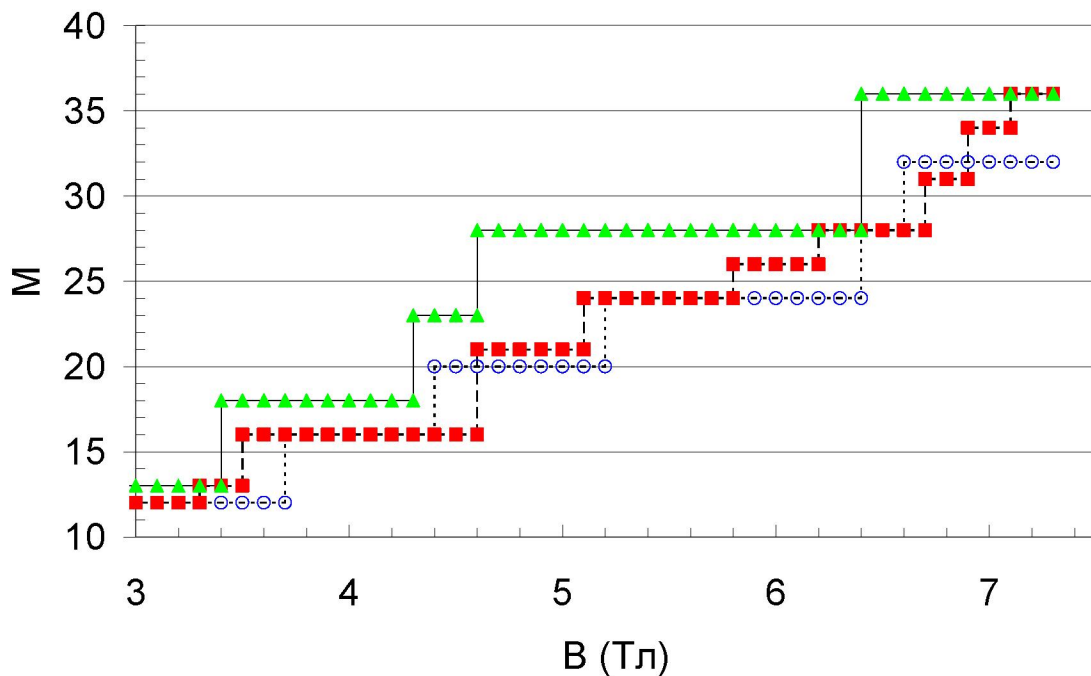


Рисунок 4.5 – Зависимость полного углового момента электронов от магнитного поля ( $N=8$ ,  $d=2$ ,  $\omega_0 = 0,5$ ): ○ —  $\Delta_{\text{sas}} = 0,1$ ; ■ —  $\Delta_{\text{sas}} = 0,17$ ; ▲ —  $\Delta_{\text{sas}} = 0,34$

электронов, занимающих уровень энергии в подзонах как симметричного состояния, так и антисимметричного состояния.

Результаты расчетов показали, что при малых  $\Delta_{sas}$  (на рисунке 4.5 при  $\Delta_{sas} = 0,1$ ) основное состояние реализуется при полном угловом моменте  $M = 12 + 4k$  ( $k=0, 1, 2, \dots$ ). Это связано с тем, что при малых  $\Delta_{sas}$  три или четыре электрона находятся в антисимметричном состоянии. Так при  $M = 12$  в обоих состояниях электроны имеют одинаковую конфигурацию (0, 1, 2, 3), а при  $M = 16$  в симметричном состоянии конфигурация электронов – (0, 1, 2, 3, 4) и в антисимметричном состоянии – (1, 2, 3).

При увеличении  $\Delta_{sas}$  величина  $N_a$  уменьшается. При  $M = 28$  и  $\Delta_{sas} = 0,34$  все электроны находятся в симметричном состоянии и при увеличении магнитного поля переходы в антисимметричное состояние отсутствуют. В этом случае зависимость  $M(B)$  подобна зависимости для отдельной квантовой точки с  $N = 8$ . При промежуточных значениях величины туннельной щели (на рисунке 4.5 при  $\Delta_{sas} = 0,17$ ) заселенность антисимметричного состояния аналогична заселенностям для  $\Delta_{sas} = 0,1$  при низких магнитных полях и для  $\Delta_{sas} = 0,34$  при высоких магнитных полях.

Состояние с  $M = 28$  и  $N_a = 0$  соответствует режиму квантового эффекта Холла для макроскопической системы с фактором заполнения уровня Ландау  $\nu = 1$ . Для результатов, представленных на рисунке 4.5, этому режиму удовлетворяет только состояние с  $\Delta_{sas} = 0,34$ .

Как и в одиночных квантовых точках, в двойных квантовых точках изменение углового момента электронов с увеличением магнитного поля приводит к осцилляциям незатухающего тока в квантовых точках. Для квантовых точек в форме колец электроны удерживаются внутри квантовых колец параболическими потенциалами с минимумом в точке  $r_0$  и частотой  $\omega_0$ . Магнитное поле  $B$  берется таким, что все электроны являются спин-поляризованными. Система нелинейных уравнений Кона-Шэма решалась численно для числа электронов от двух до десяти. Во всех

случаях при большом значении величины туннельной щели получены наборы магических чисел для полного углового момента электронов  $M=M_0+kN$ , где  $M_0=N(N-1)/2$ ,  $k=0, 1, 2, \dots$ . В этом случае основное и все метастабильные состояния имеют компактную конфигурацию электронов, и все электроны находятся в подзоне симметричного состояния. При этом зависимость  $M(B)$  представляет собой серию плато полного углового момента электронов, разделенных высотой  $N$ . Причем середины всех плато  $M_1$  близки к прямо-пропорциональной зависимости от напряженности магнитного поля, поэтому получим для ширины каждого плато

$$\Delta B=2B_1/(N+1), \quad (4.7)$$

где  $B_1$  соответствует середине первого плато с  $M=M_0+N$ .

Результаты вычислений приведены на рисунке 4.6. Кривая 1 соответствует большим  $\Delta$ , когда все электроны находятся в подзоне симметричного состояния. Период осцилляций незатухающего тока хорошо описывается

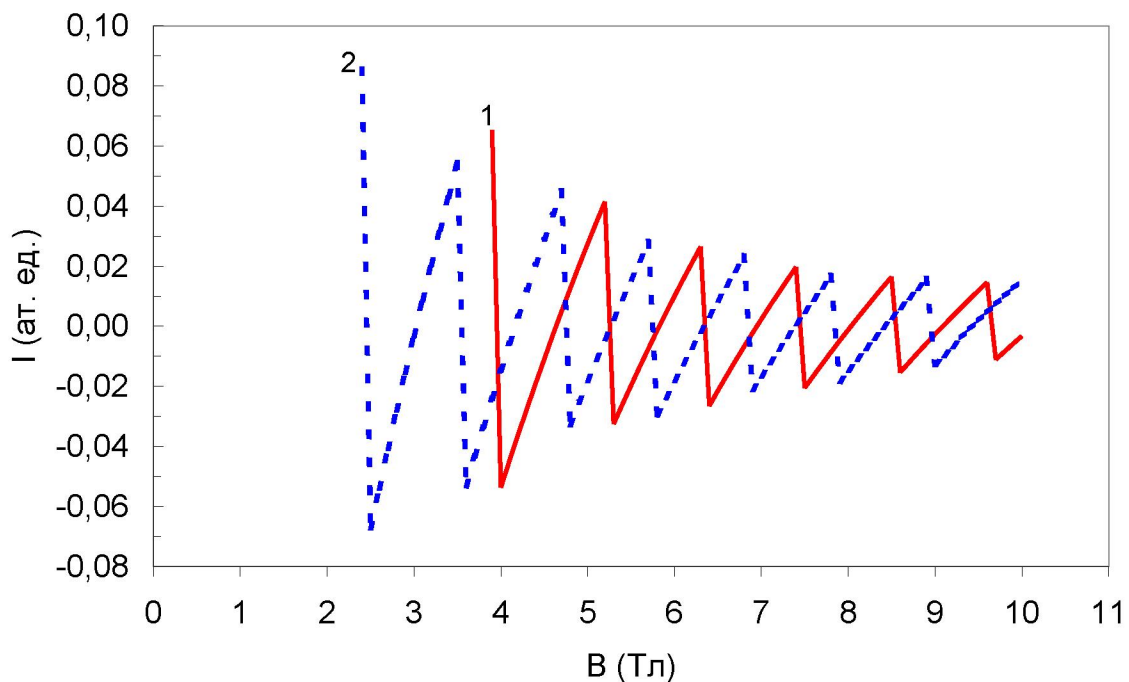


Рисунок 4.6 – Зависимость незатухающего тока  $I$  от магнитного поля.  $N=8$ ,  $d=10$  нм,  $\hbar\omega_0=6$  мэВ,  $r_0=30$  нм. 1 –  $\Delta > 3,7$  мэВ, 2 –  $\Delta < 0,15$  мэВ



формулой (4.7) (на рисунке 4.6  $B_1=4,6$  Тл). При малых величинах  $\Delta$  начинают заселяться антисимметричные состояния, и период магических чисел становится другим. В частности для  $N=8$  при  $\Delta < 0,15$  мэВ половина электронов находится в подзоне антисимметричного состояния и имеет такие же угловые моменты, как и электроны в подзоне симметричного состояния. Такие квантовые кольца можно рассматривать как независимые и период осцилляций также описывается формулой (4.7) с числом электронов  $N/2$  (кривая 2 на рисунке 4.6).

При промежуточных значениях величины  $\Delta$  зависимость  $I(B)$  внутри каждого периода становится немонотонной. Это связано с тем, что возможны переходы электронов между подзонами симметричного и антисимметричного состояния при изменении магнитного поля.

#### **4.2 Стабильность квантового холловского состояния в двойных вертикально-связанных квантовых точках**

В настоящем разделе построена количественная теория стабильности квантового холловского состояния (КХС) при  $\nu = 1$  в системе двух вертикально-связанных квантовых точек с большим числом электронов  $N$  [139]. Используется теория функционала плотности для изучения электронных свойств двух вертикально-связанных двумерных квантовых точек в перпендикулярном магнитном поле. Одинаковые квантовые точки разделены барьером и находятся на расстоянии  $d$  друг от друга. Уровни энергии симметричных и антисимметричных состояний разделены туннельной щелью  $\Delta$ , 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 (4.2)-(4.6) решается для электронов находящихся в одной квантовой точке. Полная энергия электронов вычисляется по формуле (4.1). 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  $\Delta$  (переход из КХС для сильно связанных квантовых точек). Кривые  $B_1(\omega_0)$  на рисунке 4.7 показывают

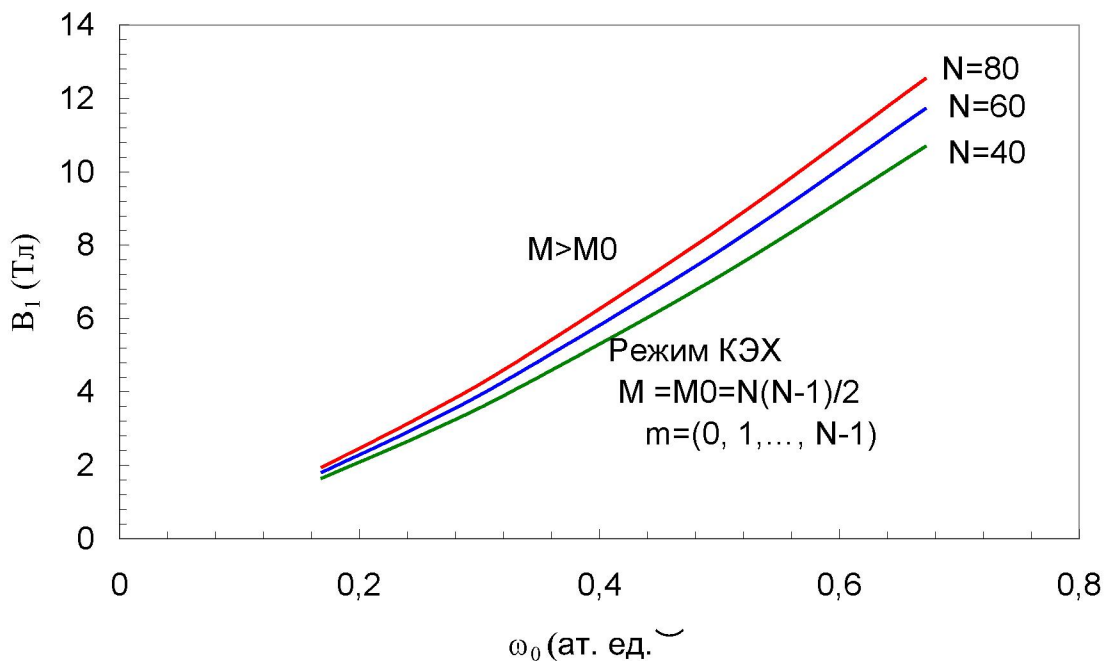


Рисунок 4.7 – Переход из состояния с конфигурацией электронов  $(0, 1, \dots, N-1)$  в состояние с конфигурацией  $(1, 2, \dots, N)$  ( $d=1$ )

структурный переход  $(0,1,\dots,N-1) \rightarrow (1,2,\dots,N)$ , который близок к переходу из состояния с  $\nu=1$  в состояние с  $\nu < 1$ . Отметим, что кривые  $B_1(\omega_0)$  хорошо описываются выражением  $B = a\omega_0^{4/3}N^{1/3}$  ( $a = 5,4$  для GaAs), которое получается из формулы (3.4) с учетом того, что при факторе заполнения, равном единице,  $n_p 2\pi L^2 = 1$ .

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 4.8. Видно, что при небольших магнитных полях (низких плотностях электронов) КХС является энергетически выгодным при любых значениях  $\Delta$ . 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 [62, 63].

Были проведены вычисления при  $\Delta = 0$  для различных значений  $d$  в интервале значений от 0,5 до 1. Результаты этих вычислений представлены на рисунке 4.9. 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 результатов, представленных на рисунках 4.8 и 4.9 видно, что КХС всегда является стабильным при  $d/L < 0,7$  (эксперименты дают значение  $d/L < 2$  [62] и  $d/L < 1,7$  [63]). 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.

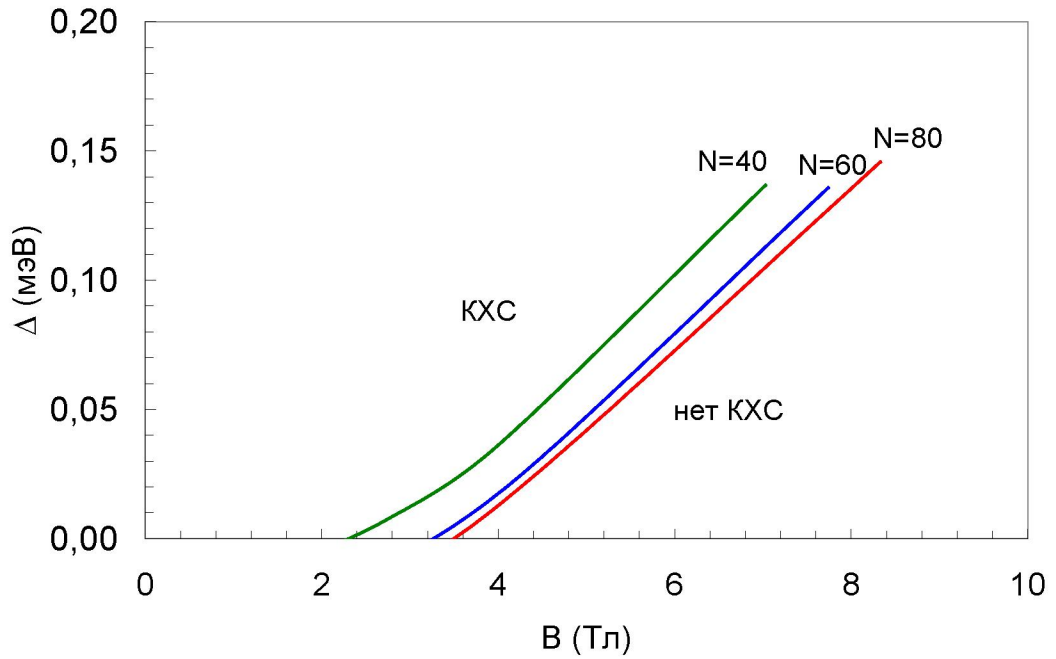


Рисунок 4.8 – Зависимость величины минимальной туннельной щели от магнитного поля ( $d=1$ )

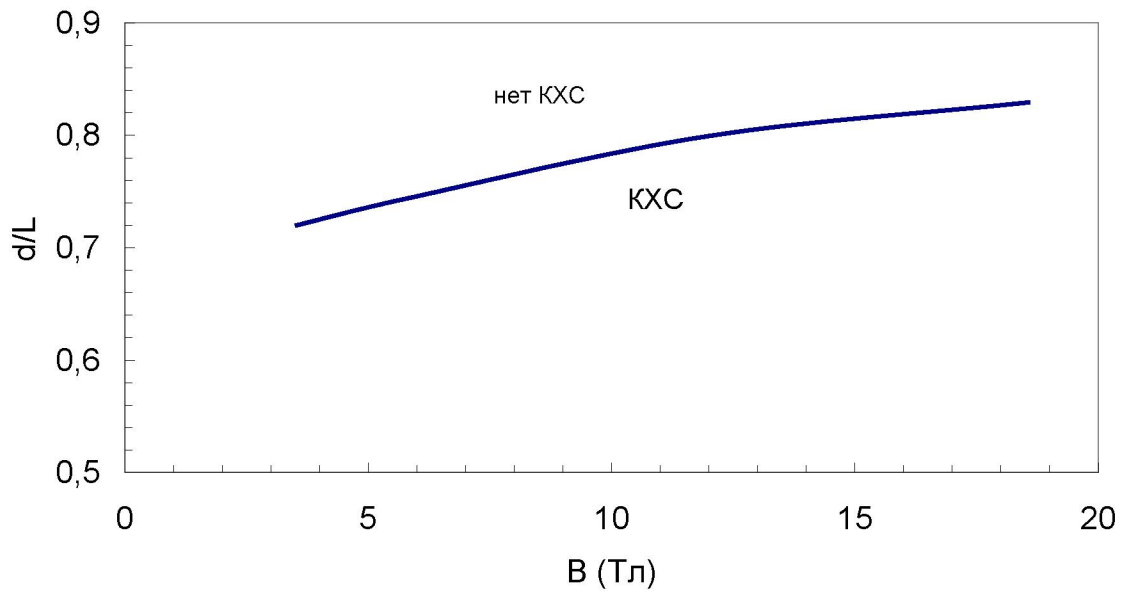


Рисунок 4.9 – Зависимость отношения  $d/L$ , при котором происходит переход в КХС, от магнитного поля ( $N=80, \Delta=0$ )

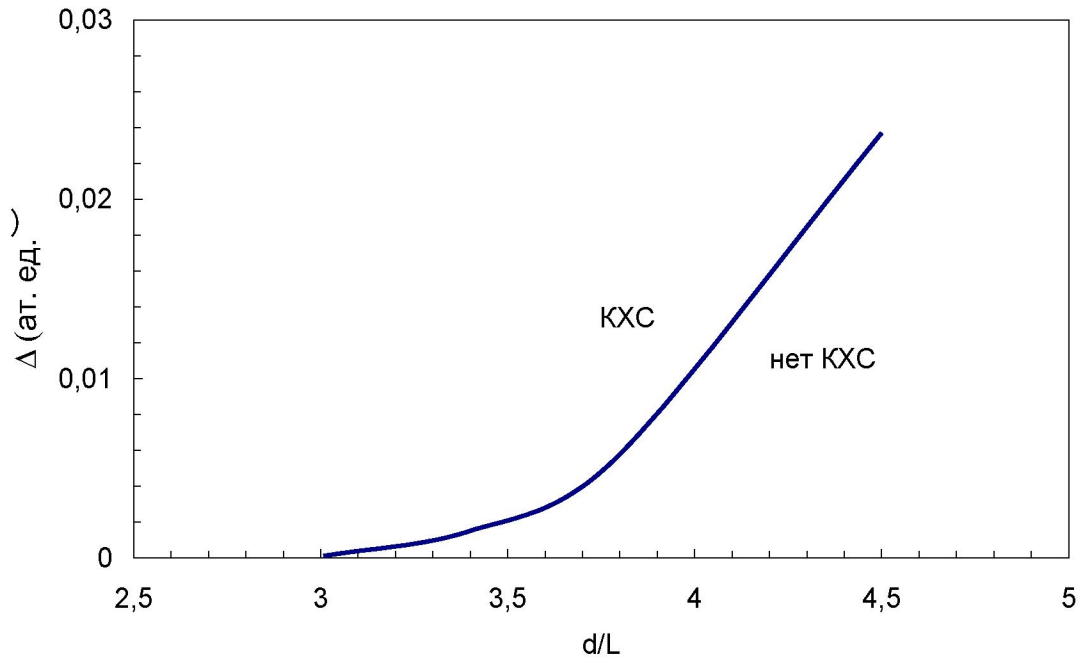


Рисунок 4.10 – Фазовая диаграмма перехода из КХС при  $\nu=1$  ( $z_0=1$ ,  $d=2,8$ ,  $N=80$ )

Изучено влияние примесного потенциала на свойства перехода в КХС [140]. В качестве примесного потенциала взята точечная 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, использовалась теория функционала плотности. Из результатов, представленных на рисунке 4.10 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  $\nu=1$ .

### 4.3 Теории функционала плотности двумерного электронно-дырочного комплекса

Двумерные электронно-дырочные системы в полупроводниках давно вызывают повышенный интерес [18, 19]. 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 [141-144], положительно или отрицательно заряженные трионы [143-147] и биэкситоны [145-147]. Могут также образовываться комплексы с большим числом частиц [22, 146]. Прогресс в этой области требует более четкого учета электронно-дырочных корреляций. Свойства электронно-дырочных комплексов изучаются с использованием точной диагонализации гамильтониана [21], вариационных вычислений [143], метода Монте-Карло [133-146] и теории функционала плотности [22, 23, 141]. Электронно-дырочные комплексы теоретически исследуются как в двумерных квантовых ямах, так и в квантовых ямах конечной ширины. Зависимость энергии связи экситонов, трионов и биэкситонов от ширины квантовых ям изучена в работах [143, 144].

В настоящей разделе, с помощью теории функционала плотности, мы вычисляем полную энергию пространственно разделенных электронно-дырочных квантовых слоев с конечным числом электронно-дырочных пар  $N$  в магнитном поле  $B$  [149, 150].

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

$$E_l[n_e, n_h] = T_e[n_e] + T_h[n_h] + E_c[n_e, n_h] + E_{xc}[n_e, n_h], \quad (4.8)$$

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.

Мы рассматриваем квантовые ямы, как слои нулевой толщины. Отметим, что при небольшом количестве частиц в выражении (4.8) необходимо исключать самодействие частиц [149]. Исключение самодействия частиц приводит к хорошему согласию с точными результатами для квантовых точек с небольшим числом электронов.

Варьируя выражение (4.8) по плотностям  $n_e$  и  $n_h$ , получим уравнения Кона-Шэма для электронов и дырок:

$$\left[ -\frac{\mu}{m_e} \frac{1}{r_e} \frac{\partial}{\partial r_e} \left( r_e \frac{\partial}{\partial r_e} \right) + \frac{\mu}{m_e} \frac{k_e^2}{r_e^2} - \frac{\mu}{m_e} \frac{k_e}{L^2} + \frac{\mu}{m_e} \frac{r_e^2}{4L^4} + V_{eff,e,k_e}(r_e) \right] \psi_{e,k_e}(r_e) = E_{e,k_e} \psi_{e,k_e}(r_e), \quad (4.9)$$

$$\left[ -\frac{\mu}{m_h} \frac{1}{r_h} \frac{\partial}{\partial r_h} \left( r_h \frac{\partial}{\partial r_h} \right) + \frac{\mu}{m_h} \frac{k_h^2}{r_h^2} - \frac{\mu}{m_h} \frac{k_h}{L^2} + \frac{\mu}{m_h} \frac{r_h^2}{4L^4} + V_{eff,h,k_h}(r_h) \right] \psi_{h,k_h}(r_h) = E_{h,k_h} \psi_{h,k_h}(r_h), \quad (4.10)$$

где  $k_e$  ( $k_h$ ) – угловой момент электрона (дырки),  $m_e$  ( $m_h$ ) – масса электрона (дырки),  $L$  – магнитная длина,  $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ ,

$$V_{eff,e,k_e}(r) = -V_h(r, d) + V_e(r, 0) - V_{e,k_e}(r, 0) + V_{xc,e}(r),$$

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

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

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

$$n_{h,k_h}(r) = \psi_{h,k_h}^2(r), \quad n_h(r) = \sum_{k_h} n_{h,k_h}(r), \quad d - \text{расстояние между электронной и}$$

дырочной квантовыми ямами.

Здесь и далее используется экситонная система единиц: энергия измеряется в единицах  $Ry_{ex} = e^2 / 2\epsilon a_{ex}$ , а длина в единицах  $a_{ex} = \epsilon \hbar^2 / \mu e^2$ .

В рамках теории функционала плотности изучим простейшую систему – двумерный экситон при  $d = 0$  (прямой экситон) в нулевом магнитном поле. Нам не известно приемлемое выражение для  $E_{xc}$ , поэтому проведем вычисления для  $E_{xc} = 0$ . В этом случае выражение для полной энергии экситона имеет вид:

$$E_t = E_{e,0} + E_{h,0} + \int V_e(r, 0) \psi_{e,0}^2(r) dr \quad (4.11)$$

Результаты самосогласованного решения уравнений Шредингера (4.9) и (4.10) показали (рисунок 4.11), что энергия экситона сильно отличается

от точного значения, равного - 4. Так при отношении масс  $m_e/m_h = 0,13$  (соответствует InP) энергия связи экситона  $E_{ex} = -E_t$  в два раза меньше, чем точное значение. Такое различие связано с тем, что не учитывались корреляции между электроном и дыркой, которые зависят от интеграла перекрытия волновых функций электрона и дырки  $P = \int \psi_e(r)\psi_h(r)dr$ . Выражение  $E_t^* = E_t - \alpha \cdot P$ , (подгоночный параметр  $\alpha = 2,3$ ) с хорошей точностью (ошибка меньше 10 %) дает хорошее приближение для энергии двумерного экситона (кривая 2 на рисунке 4.11).

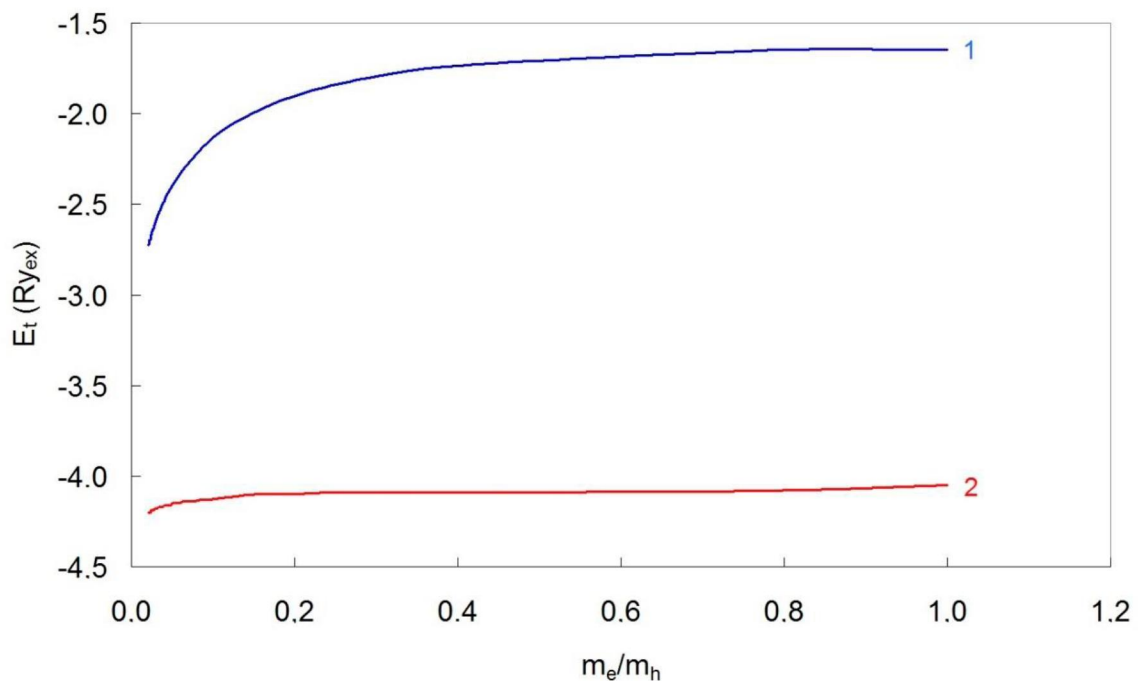


Рисунок 4.11 – Зависимость энергии экситона от отношения массы электрона к массе дырки (1 – решение уравнений Шредингера, 2 – вычисления по формуле  $E_t^* = E_t - \alpha \cdot P$ )

При увеличении массы дырки интеграл перекрытия уменьшается за счёт большей локализации дырки вблизи  $r = 0$  (рисунок 4.12). При бесконечной массе дырки следует ожидать, что волновая функция дырки  $\psi_h \approx \delta(r)$ , и в этом случае экситон можно рассматривать как электрон, локализованный на положительно заряженном примесном центре. Для такой системы энергия связи будет равна точному значению.



Вычислим энергию электронно-дырочных пар в сильном магнитном поле. 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

$$E_{xc} = \int \varepsilon_{x,e}(n_e)n_e(r)dr - \sum_{k_e} \int \varepsilon_{x,e}(n_{e,k_e})n_{e,k_e} dr + \int \varepsilon_{x,h}(n_h)n_h(r)dr - \sum_{k_h} \int \varepsilon_{x,h}(n_{h,k_h})n_{h,k_h} dr, \quad (4.12)$$

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

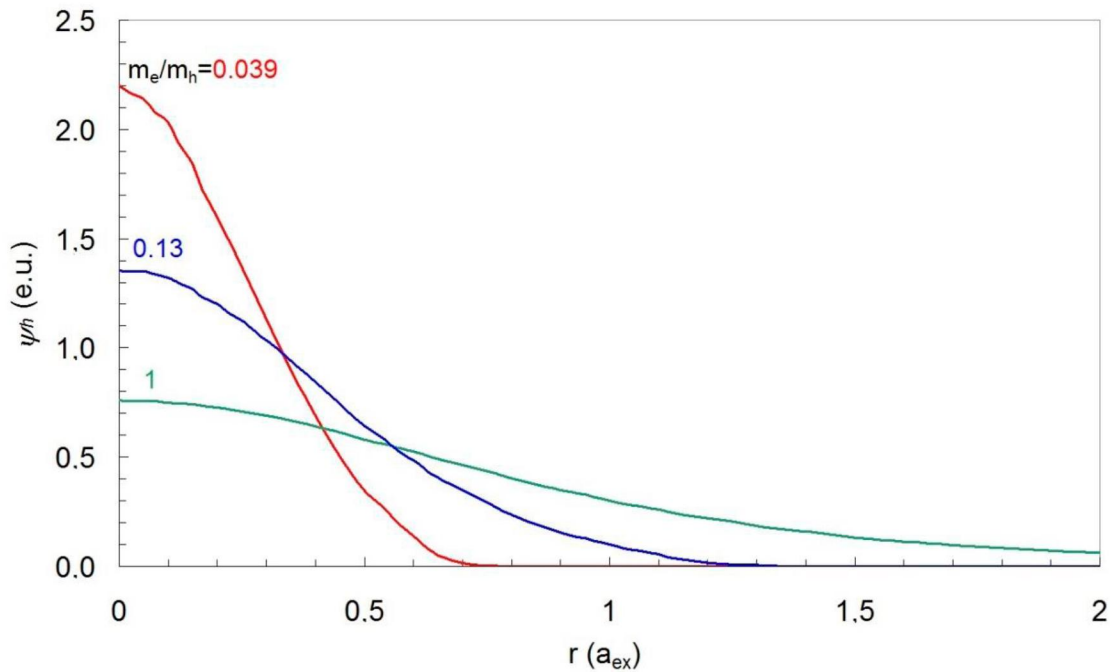


Рисунок 4.12 – Профили волновой функции дырки при различных отношениях масс

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 4.13 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.

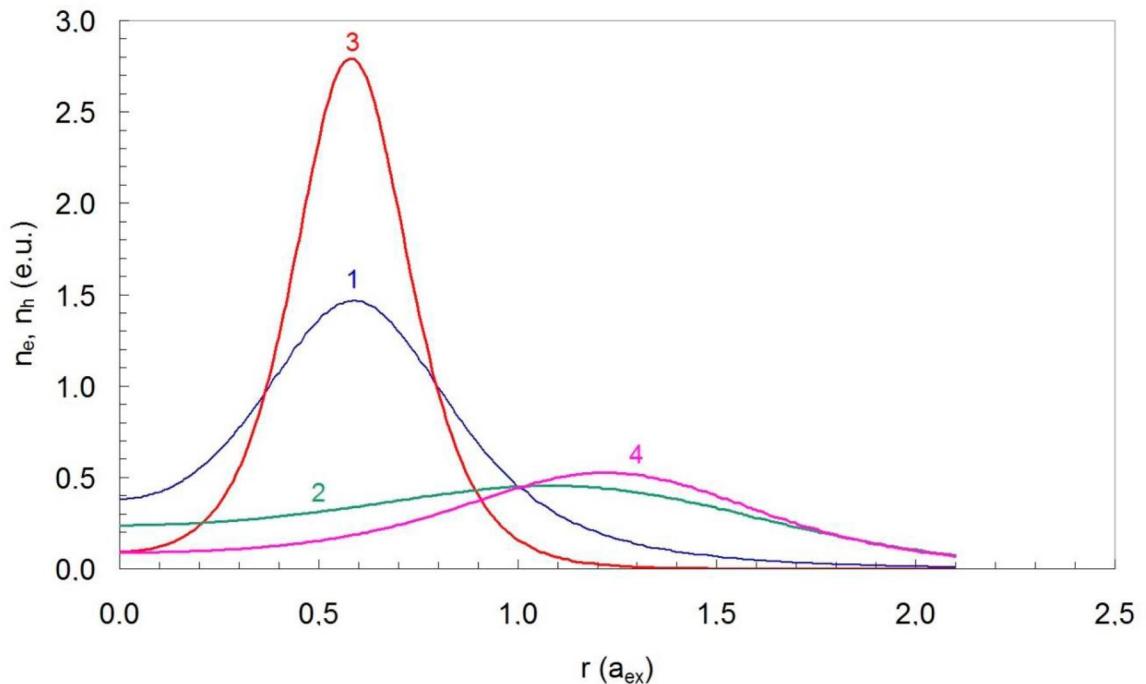


Рисунок 4.13 – Профили плотности электронов (1 –  $d=0$ , 2 –  $d=3,6$ ) и дырок (3 –  $d=0$ , 4 –  $d=3,6$ ). ( $B=8$  Тл,  $N=4$ ,  $m_e=0,067$ ,  $m_h=2m_e$ )

На рисунках 4.14 и 4.15 представлены результаты вычислений энергии на одну электронно-дырочную пару  $E_{eh}=E_t/N$  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 4.14) и  $d > 1,2$  для  $m_h=2m_e$  (рисунок 4.15). Следует ожидать, что с уменьшением отношения  $m_e/m_h$  область стабильности электронно-дырочного комплекса с  $N > 1$  увеличивается.

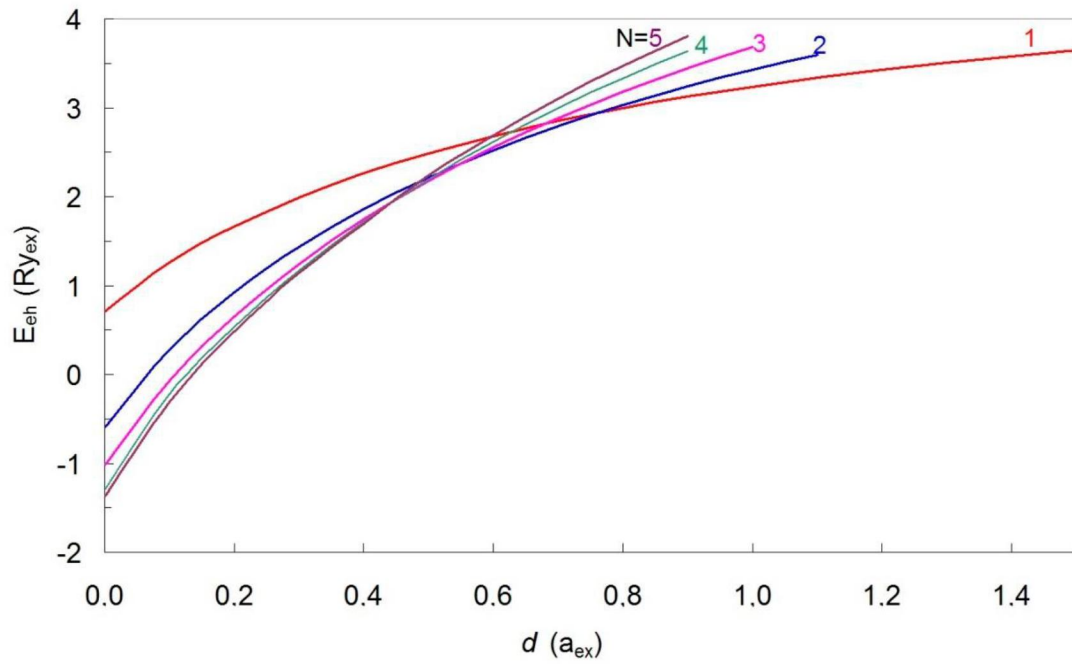


Рисунок 4.14 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от расстояния между квантовыми слоями ( $B=8$  Тл,  $m_e=0,067$ ,  $m_h=m_e$ )

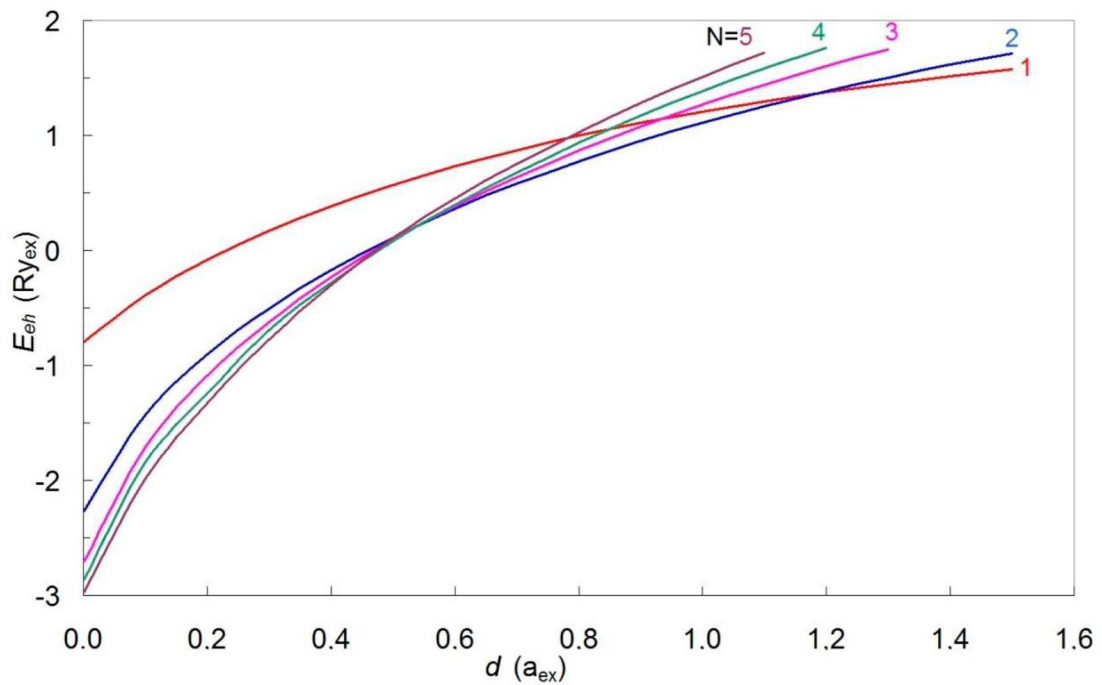


Рисунок 4.15 – Зависимость энергии электронно-дырочной пары от расстояния между квантовыми слоями ( $B=8$  Тл,  $m_e=0,067$ ,  $m_h=2m_e$ )

#### 4.4 Магические числа и осцилляции незатухающего тока в электронно-дырочных квантовых точках

В последние годы активно исследуются квантовые эффекты в мезоскопических и наноразмерных структурах. Хорошо известно, что в тонких сверхпроводящих кольцах температура сверхпроводящего перехода имеет осцилляционный вид с периодом равным половине кванта магнитного потока  $\Phi_0 = h/e$ . В квантовых кольцах ситуация значительно сложнее из-за межэлектронного взаимодействия. Осцилляции Литтл-Паркса и осцилляции незатухающего тока в полупроводниках квантовых кольцах связаны с изменением энергии системы в магнитном поле. В частности в двумерных системах с аксиальной симметрией оба эффекта объясняются изменениям углового момента электронов в квантовых кольцах и параметра порядка в сверхпроводниках кольцах. Осцилляции незатухающего тока в квантовых полупроводниковых кольцах активно изучаются как теоретически [35], так и экспериментально [53, 151]. Менее изучены системы с двумерными электронно-дырочными комплексами.

В настоящем разделе вычисляются незатухающие токи и полная энергия пространственно разделенных двумерных электронов и дырок в поперечном магнитном поле  $B$  [22]. Как и в разделе 4.3 используем теорию функционала плотности. Электронные и дырочные слои связаны только кулоновским взаимодействием (внешние удерживающие потенциалы отсутствуют). Мы предполагаем, что внешнее магнитное поле достаточно сильное, чтобы полностью поляризовать все электроны и дырки

Незатухающие токи для электронов и дырок представляет собой сумму парамагнитного и диамагнитного токов:

$$I_e = -\frac{\mu}{m_e} \sum_{k_e} \int \frac{2k_e}{r} \psi_{e,k_e}^2(r) dr + \frac{\mu}{m_e} \frac{N}{2\pi L^2}, \quad (4.13)$$

$$I_h = \frac{\mu}{m_h} \sum_{k_h} \int \frac{2k_h}{r} \psi_{h,k_e}^2(r) dr - \frac{\mu}{m_h} \frac{N}{2\pi L^2}, \quad (4.14)$$

где  $N$  – число электронно-дырочных пар.

Уравнения Кона-Шэма (4.9)-(4.10) 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 4.16 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 [152] при  $N = 3$ , когда расстояние между электронными и дырочными точками относительно велико. Известно, что магические числа с периодом  $N$  встречаются в одиночных квантовых точках. Отметим, что в квантовых точках период магических чисел может быть равен  $(N - 1)$ . Результаты, представленные на рисунке 4.16, 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  $K_h = 20$ .

Изменение угловых моментов электронов и дырок приводит к скачку незатухающего тока. На рисунке 4.17 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 4.17 соответствует значениям  $K_e = K_h = 20$ , а последующие сегменты значениям

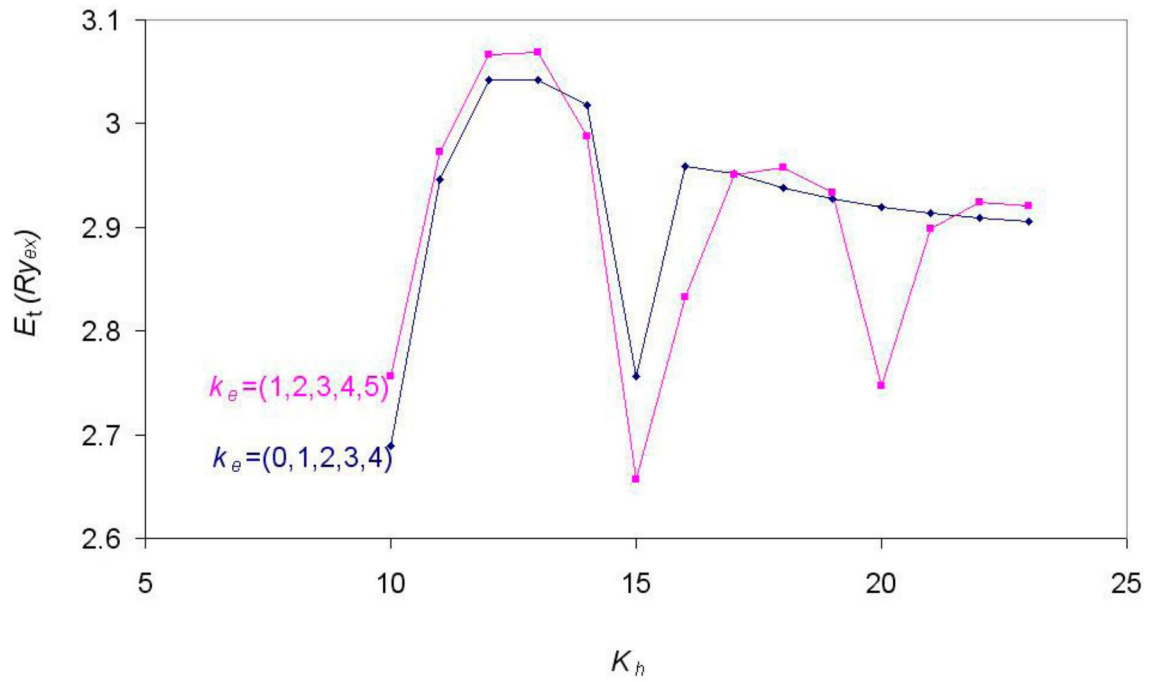


Рисунок 4.16 – Зависимость полной энергии от суммарного углового момента дырок ( $N = 5$ ,  $d = 2$ ,  $B = 2.4$  Т,  $m_e = m_h = 0,077m_0$ ). Точки соединены линиями для наглядности

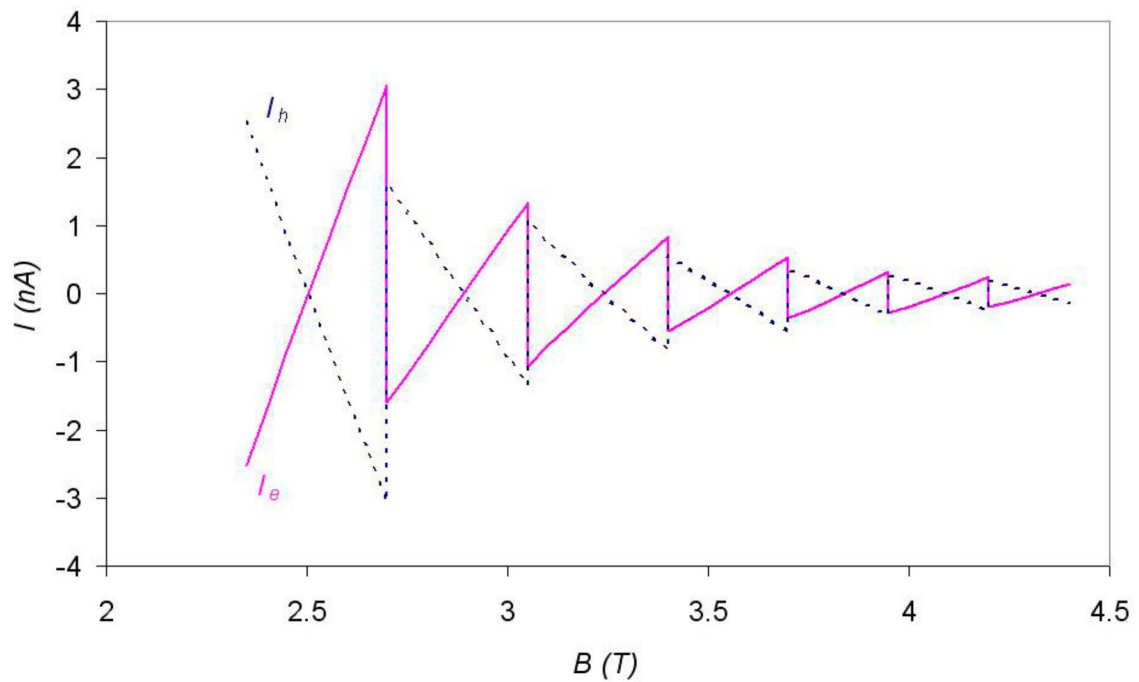


Рисунок 4.17 – Зависимость незатухающего тока от магнитного поля ( $N = 5$ ,  $d = 2$ ,  $m_e = m_h = 0,077m_0$ )

$K_e$  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 4.18 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 4.19). Отметим, что амплитуда осцилляций незатухающего тока у дырок меньше, чем у электронов, а период осцилляций становится больше по сравнению со случаем  $m_e = m_h$ .

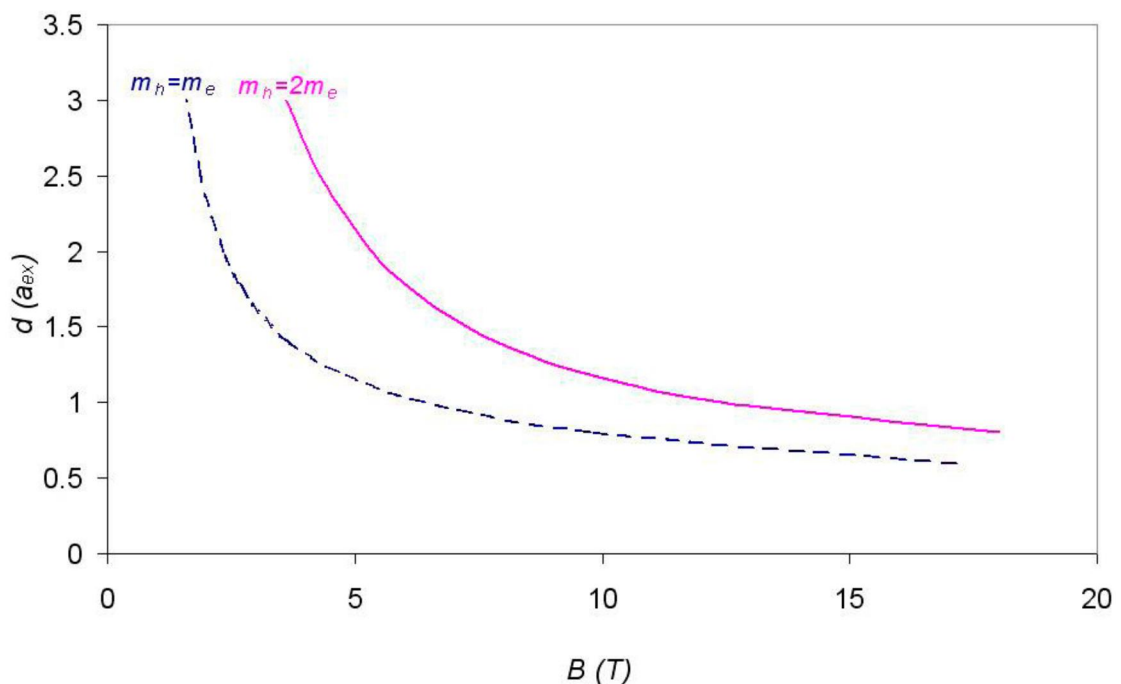


Рисунок 4.18 – Фазовая диаграмма перехода из состояния  $k_e=(0,1,2,3,4)$  и  $k_h(0,1,2,3,4)$  в состояние  $k_e=(1,2,3,4,5)$  и  $k_h=(1,2,3,4,5)$ .  $N=3$ ,  $m_e=0,077$

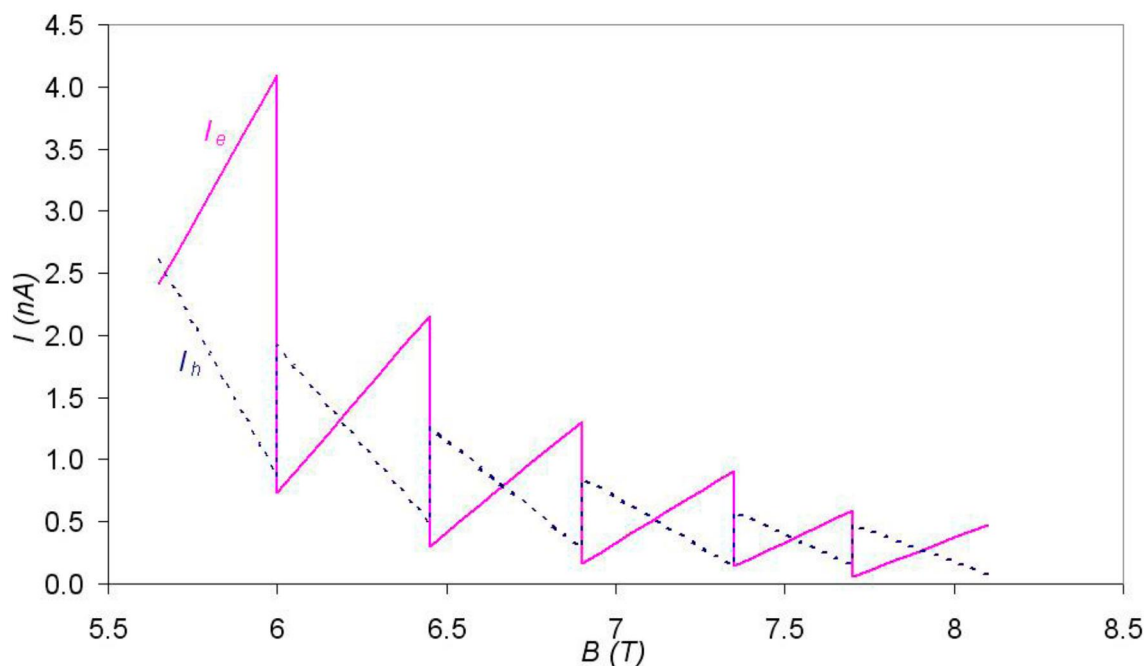


Рисунок 4.19 – Зависимость незатухающего тока от магнитного поля ( $N=3$ ,  $d=2$ ,  $m_h=2m_e$ ,  $m_e=0,077$ )

#### 4.5 Основные выводы

Теоретическое исследование электронной структуры вертикально-связанных квантовых точек в магнитном поле проводилось с помощью теории функционала плотности. Численно решалась система нелинейных уравнений Кона-Шэма для двумерных электронов в двойных вертикально-связанных квантовых точках в перпендикулярном магнитном поле.

Проведено сравнение полученных результатов с точными результатами. Вычисленные значения энергии оказались близки к точным значениям.

Найдены новые серии магических чисел для полного углового момента электронов в вертикально-связанных квантовых точках и объяснена их природа.

В координатах величина туннельной щели – напряженность магнитного поля построена фазовая диаграмма перехода в квантовое холловское состояние в двойных квантовых точках при факторе



заполнения уровня Ландау, равном единице. Показано, что для нулевой туннельной щели КХС может быть стабильным.

Для нулевой туннельной щели при изменении расстояния между квантовыми точками  $d$  величина магнитного поля, при котором КХС является стабильным, сильно изменяется. Однако критическое значение отношения  $d/L$  ( $L$  – магнитная длина) изменяется слабо: КХС является стабильным при  $d/L < 0,7 - 0,8$  (экспериментальные результаты дают  $d/L < 1,8$ ). Показано, что положительно заряженная примесь сильно влияет на условие стабильности КХС. В этом случае найдено, что в квантовых точках с нулевой туннельной щелью КХС является стабильным при  $d/L < 3$ .

В рамках теории функционала плотности вычислена энергия двумерного электронно-дырочного комплекса в магнитном поле в зависимости от расстояния  $d$  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. Различные сегменты возникают из-за возрастания угловых моментов электронов и дырок при увеличении магнитного поля.

## Глава 5

### Спиновая поляризация и электронно-дырочная жидкость в квантовых проволоках

#### 5.1 Спиновая поляризация электронов в квантовой проволоке

В настоящее время большой интерес вызывают одномерные квантовые проволоки, свойства которых исследованы меньше, чем свойства квантовых ям и двумерных квантовых точек. В таких системах при низких плотностях электронов могут возникать такие явления, как вигнеровская кристаллизация, спонтанная поляризация электронов в нулевом магнитном поле, “0,7 аномалия” проводимости [153-156]. Перечисленные выше явления все ещё далеки до полного теоретического объяснения.

Особый интерес представляет изучение возможной спиновой поляризации электронов в квазиодномерных каналах в нулевом магнитном поле. Экспериментальные результаты, представленные в работе [156], указывают на наличие спиновой поляризации в узкой квантовой проволоке. В этой работе наблюдалась спонтанная спиновая поляризация электронов в квантовой проволоке.

В неполяризованном состоянии проводимость квантовой проволоки составляет целое число квантов  $G_0=2e^2/h$ . В сильных магнитных полях электроны в квантовой проволоке являются спин-поляризованными, поэтому проводимость квантовой проволоки равняется  $G_0/2$ . В работе [156] наблюдалась ступенька проводимости при значении  $G_0/2$  без магнитного поля (рисунок 5.1В), что свидетельствует о спонтанной спиновой поляризации.

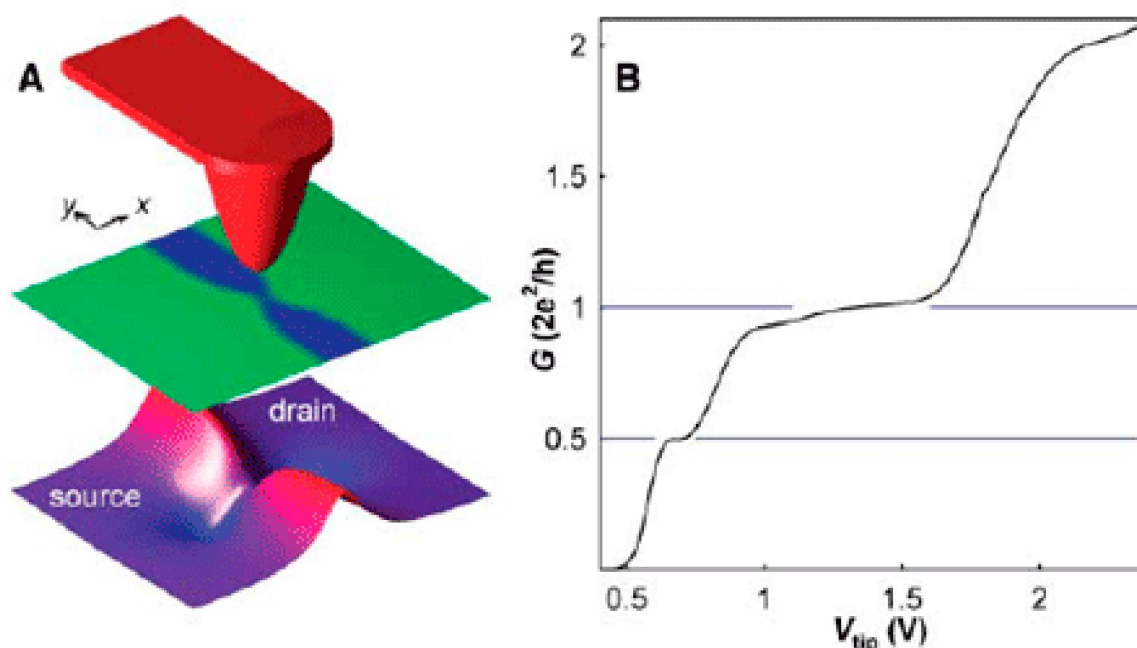


Рисунок 5.1 – Вверху показано острие сканирующего микроскопа; в середине показана схема поверхности образца с заряженной областью (синий цвет), внизу показан потенциальный рельеф (А). Зависимость проводимости от потенциала на острие (В). Рисунок взят из работы [156]

Ферромагнитное состояние в квантовой проволоке может возникнуть за счет обменного взаимодействия электронов. Ранее эффекты спиновой поляризации электронов в квантовой проволоке изучались с использованием метода Хартри-Фока [157, 158], одномерной модели Хаббарда [157], теории функционала плотности [74, 160, 161]. В настоящее время одним из самых мощных методов (исключая точную диагонализацию многочастичного гамильтониана) учета электрон-электронного взаимодействия считается теория функционала плотности.

В данной работе используется теория функционала плотности для изучения перехода в спин-поляризованное состояние электронов в квантовой проволоке в нулевом магнитном поле.

Рассмотрим одиночный квазиодномерный канал [74]. 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 проволоки 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  $n(x)$  :

$$E_T[n] = T[n] + \frac{1}{2} \int V_H(x)[n(x) - n_p] dx + E_{xc}[n], \quad (5.1)$$

где  $T[n]$  - кинетическая энергия невзаимодействующих электронов,  $E_{xc}[n]$  - обменно-корреляционная энергия. Второй член в выражении (5.1) есть кулоновская энергия электронов.

Далее используем атомную систему единиц, в которой энергия выражается в единицах  $Ry = \frac{e^2}{2ka_B}$ , а длина в боровских радиусах

$a_B = \frac{k\hbar^2}{m_e e^2}$ , где  $m_e$  - эффективная масса электрона,  $k$  - диэлектрическая проницаемость.

Как правило, корреляционной энергией можно пренебречь и в вычислениях учитывается только обменная энергия [162]

$$\varepsilon_x(n) = -16n^{1/2} / 3\pi^{1/2} g_s^{1/2}, \quad (5.2)$$

где  $g_s$  – спиновый фактор.

Из выражения (5.1) получаем уравнение Шредингера

$$-\frac{d^2\psi_i}{dx^2} + V_{eff}(x)\psi_i = E_i\psi_i(x), \quad (5.3)$$

$$\text{где } V_{eff}(x) = V_H(x) + V_x(x), \quad (5.4)$$

$$V_H(x) = 4 \int_{-\infty}^{\infty} (n_p - n(x_1)) \ln|x - x_1| dx_1, \quad (5.5)$$

$$V_x(x) = \frac{d(\varepsilon_x(n) n)}{dn}. \quad (5.6)$$

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

$$n(x) = N\psi_0^2(x), \quad (5.7)$$

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

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решалась численно методом итераций. На рисунке 5.2 показаны потенциалы и волновая функция электронов. Видно, что кулоновский потенциал дает значительно меньший вклад в эффективный потенциал, чем обменный.

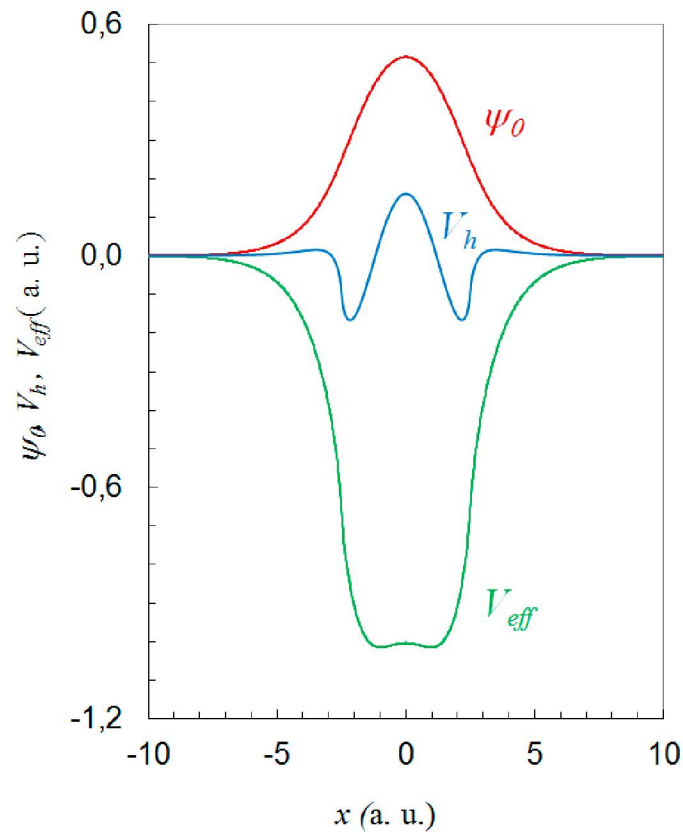


Рисунок 5.2 – Профили волновой функции и потенциалов электронов ( $a=5$ ,  $n_p=0,05$ ,  $g_s=1$ )

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

$$T = \frac{\pi^2}{3g_s^2} N^3 + N(E_0 - \int V_{eff}(x)\psi_0^2(x)dx) \quad (5.8)$$

Из выражений (5.2) и (5.8) видно, что при высоких плотностях  $N$  всегда энергетически выгодным будет состояние с неполяризованными электронами ( $g_s=2$ ).

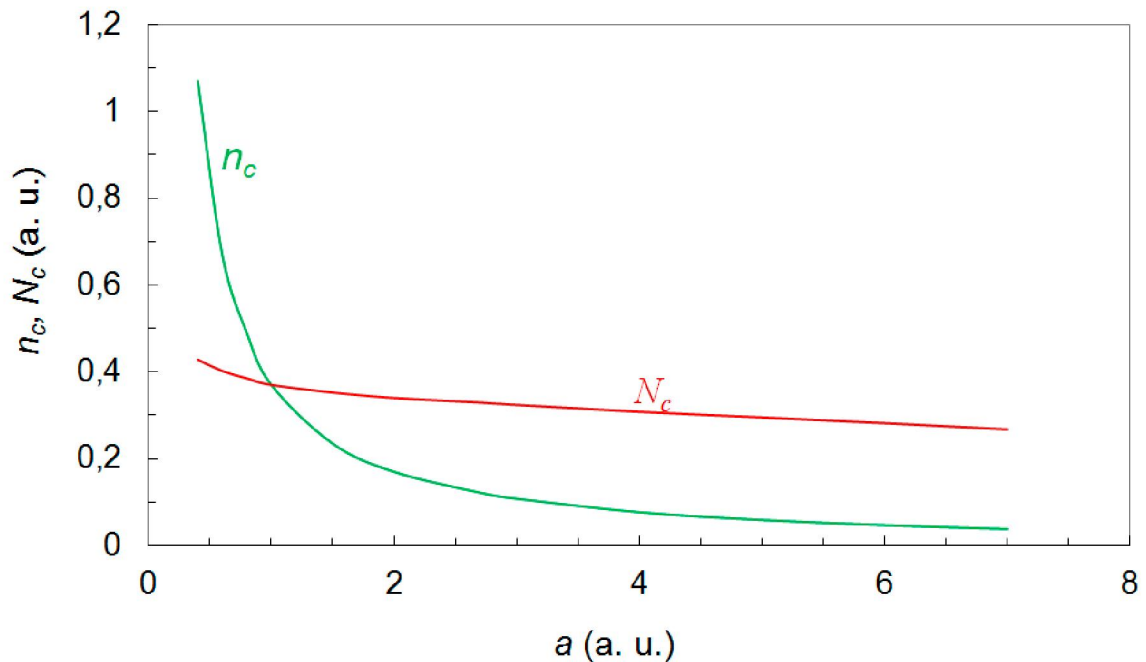


Рисунок 5.3 – Фазовая диаграмма перехода в спин-поляризованное состояние в квантовой проволоке

Система уравнений Кона-Шэма (5.2)-(5.7) 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 5.3). Отметим, что для узких квантовых проволок критическая плотность  $n_c$  может быть высокой, однако величина  $N_c$  изменяется слабо. Из результатов, представленных на рисунке 5.3, 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.

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

$$\psi_0(x) = \frac{\exp(-x^2/2b^2)}{\pi^{1/4}(b)^{1/2}} . \quad (5.9)$$

Тогда полная энергия имеет следующий вид:

$$E_t = \frac{\pi^2 N^3}{3g_s^2} + \frac{N}{2b^2} - \left(\frac{2}{3}\right)^{3/2} \frac{8N^{3/2}}{\sqrt{bg_s}\pi^{3/4}} . \quad (5.10)$$

Первые два слагаемых соответствуют кинетической энергии, третье слагаемое – обменной энергии. Из выражения (5.10) находим  $b$ , при котором достигается минимум энергии:

$$b = \frac{3\pi^{1/2}}{4} \left(\frac{g_s}{2N}\right)^{1/3} . \quad (5.11)$$

Подставляя значение  $b$  в выражение (5.10) получаем

$$E_t = \frac{3,29N^3}{g_s^2} - \frac{1,35N^{5/3}}{g_s^{2/3}} . \quad (5.12)$$

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 5.3.

Можно также оценить значение критической плотности, представляя обменный потенциал как

$$V_x(x) = -\frac{8N^{1/2} \exp(-x^2/2b^2)}{\pi^{3/4}(bg_s)^{1/2}} \approx -\frac{8N^{1/2}}{\pi^{3/4}(bg_s)^{1/2}} \left(1 - \frac{x^2}{2b^2}\right) . \quad (5.12)$$

Для такого потенциала получаем из уравнения Шредингера (5.3)

$$b = \frac{\pi^{1/2}}{2} \left(\frac{g_s}{2N}\right)^{1/3} . \quad (5.13)$$

Этому значению  $b$  соответствует полная энергия

$$E_t = \frac{3,29N^3}{g_s^2} - \frac{1,19N^{5/3}}{g_s^{2/3}} . \quad (5.14)$$

Используя выражение (5.14) получаем критическую плотность электронов  $N_c=0,27$ , что также хорошо согласуется с точными вычислениями.

Изучим влияние геометрии квантовой проволоки на переход в поляризованное состояние. Рассмотрим квантовую проволоку с сечением в виде круга. Как и в предыдущем случае не учитываем вклад кулоновского взаимодействия и удерживающего потенциала в полную энергию (5.1). В цилиндрической системе координат полная энергия электронов запишется как

$$E_t[n] = T[n] + \int \varepsilon_x n(r) 2\pi r dr, \quad (5.15)$$

где  $T[n]$  – кинетическая энергия невзаимодействующих электронов,  $\varepsilon_x$  – обменная энергия.

Обменная энергия для трехмерного электронного газа  $\varepsilon_{xc} = 1,85n^{1/3}/g_s^{1/3}$ .

Для поперечного движения электронов запишем уравнения Шредингера:

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_x(r) \right) \psi(r) = E \psi(r), \quad (5.15)$$

где обменный потенциал  $V_x = 2,47n^{1/3}/g_s^{1/3}$ ,  $n(r) = N\psi^2(r)$ ,  $N$  – одномерная плотность электронов.

Возьмем волновую функцию с параметром  $b$  в виде

$$\psi(z) = \exp(-r^2/(2b^2))/(\pi^{1/2}b). \quad (5.16)$$

Разложим  $V_x(r)$  в ряд и, учитывая только квадратичный член по  $r$ , получим из уравнения Шредингера (5.15):

$$b = 1,1 \frac{g_s^{1/4}}{N^{1/4}}. \quad (5.17)$$

Для этого значения  $b$  получаем выражение для полной энергии

$$E_t = \frac{3,29N^3}{g_s^2} - \frac{0,947N^{3/2}}{g_s^{1/2}}. \quad (5.18)$$



Из выражения (5.18) получаем критическую плотность электронов  $N_c=0,23$ . Полученная величина  $N_c$  близка к критической плотности, полученной для квантовой проволоки с поперечным сечением в виде отрезка. Отметим, что проведенные аналитические оценки могут быть использованы для квантовой проволоки с радиусом поперечного сечения порядка  $b$ . В общем случае необходимо учитывать кулоновское взаимодействие и численно решать уравнение Шредингера (5.15).

## 5.2 Электронная структура квантовой проволоки при низких плотностях электронов

При низких плотностях электронов возникают новые явления, как вигнеровская кристаллизация, спонтанная поляризация электронов в нулевом магнитном поле. Ожидается, что при низких плотностях электронная плотность поперек оси квантовой проволоки будет неоднородной.

Нами разработан и реализован на ЭВМ эффективный алгоритм численного решения уравнения Шредингера из системы уравнений Кона-Шэма (5.2)-(5.7). Предлагаемый алгоритм протестирован и является более эффективным по сравнению со стандартным методом диагонализации. Компьютерная программа для решения нелинейных уравнений Кона-Шэма позволяет проводить расчеты для квантовой проволоки с низкой плотностью электронов (мелкие квантовые ямы с одним связанным состоянием), что особенно важно для изучения перехода в спин-поляризованное состояние и изучения систем с сильно неоднородным электронным газом.

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма (5.2)-(5.7) решалась численно. Вначале задавалась волновая функция, затем находился эффективный потенциал  $V_{eff}(x)$ . В качестве начального приближения для волновой функции нами использовались различные волновые функции (с

одним, двумя и тремя максимумами). Во всех трех случаях конечный результат получался один и тот же.

Результаты численного решения уравнений Кона-Шэма приведены на рисунках 5.4 и 5.5. Видно, что при низкой плотности электронов кулоновский потенциал  $V_h$  дает значительно меньший вклад в эффективный потенциал  $V_{eff}$  чем обменно-корреляционный  $V_{xc}$ . В этом случае ожидалось, что плотность электронов будет неоднородной поперек оси квантовой проволоки. Однако, проведенные расчеты для широкой области  $a$  и  $n_p > 0,001$  показали, что при низких плотностях заселен только один уровень энергии и плотность электронов имеет один максимум. Таким образом, при  $n_p > 0,001$  проведенные вычисления не привели к расслоению профиля плотности электронов.

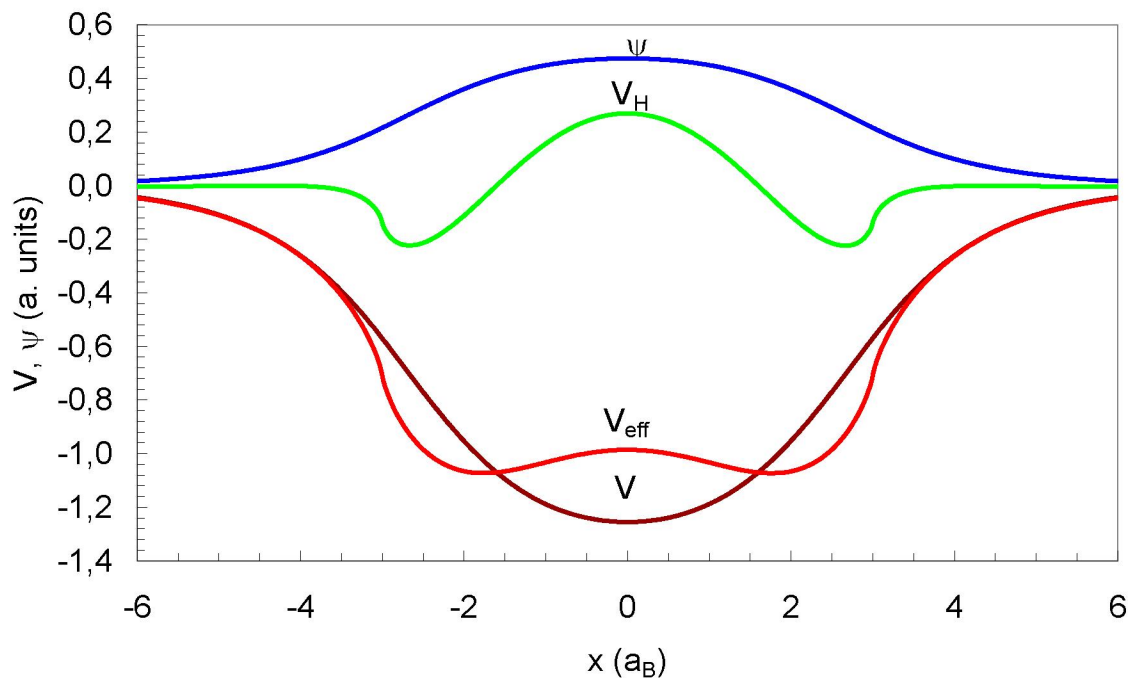


Рисунок 5.4 – Профиль волновой функции и потенциалов электронов ( $a=6$ ,  $n_p=0,06$ )

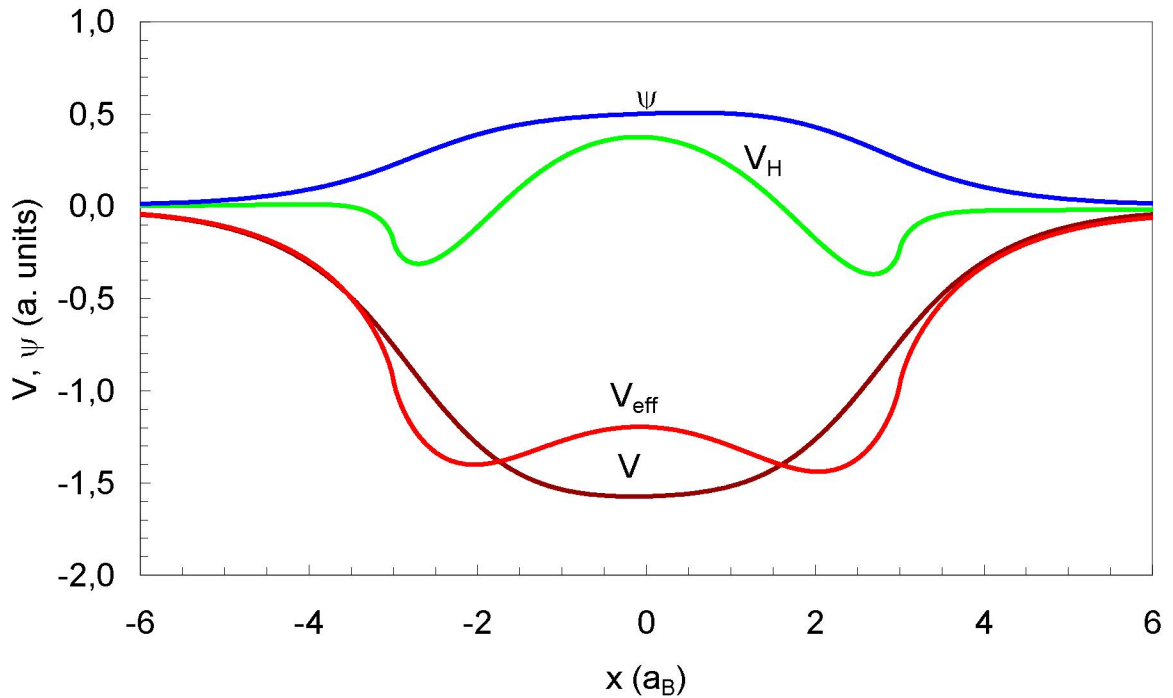


Рисунок 5.5 – Профиль волновой функции и потенциалов электронов ( $a=6$ ,  $n_p=0,1$ )

Рассмотрим одиночный квазиодномерный слой электронов в перпендикулярном магнитном поле. Внутри квантовой проволоки 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). Магнитное поле берется таким, чтобы все электроны были спин-поляризованными.

Для такой системы уравнения Кона-Шэма имеют следующий вид (используется атомная система единиц)

$$-\frac{d^2\psi_k(x)}{dx^2} + \frac{(x - kL^2)^2}{L^4}\psi_k(x) + V_{\text{eff}}(x)\psi_k(x) = E_k\psi_k(x), \quad (5.19)$$

где  $V_{\text{eff}}(x) = V_H(x) + V_x(x)$ ,  $V_H(x) = 4 \int_{-\infty}^{\infty} (n_p - n(x_1)) \ln|x - x_1| dx_1$ ,

$$V_x(x) = \frac{d(\varepsilon_x(n) n)}{dn},$$

$$n(x) = \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi} \psi_k^2(x) dk, \quad k_F = \pi n_p a, \quad \varepsilon_x = \pi \sqrt{2\pi L n}, \quad L - \text{магнитная длина.}$$

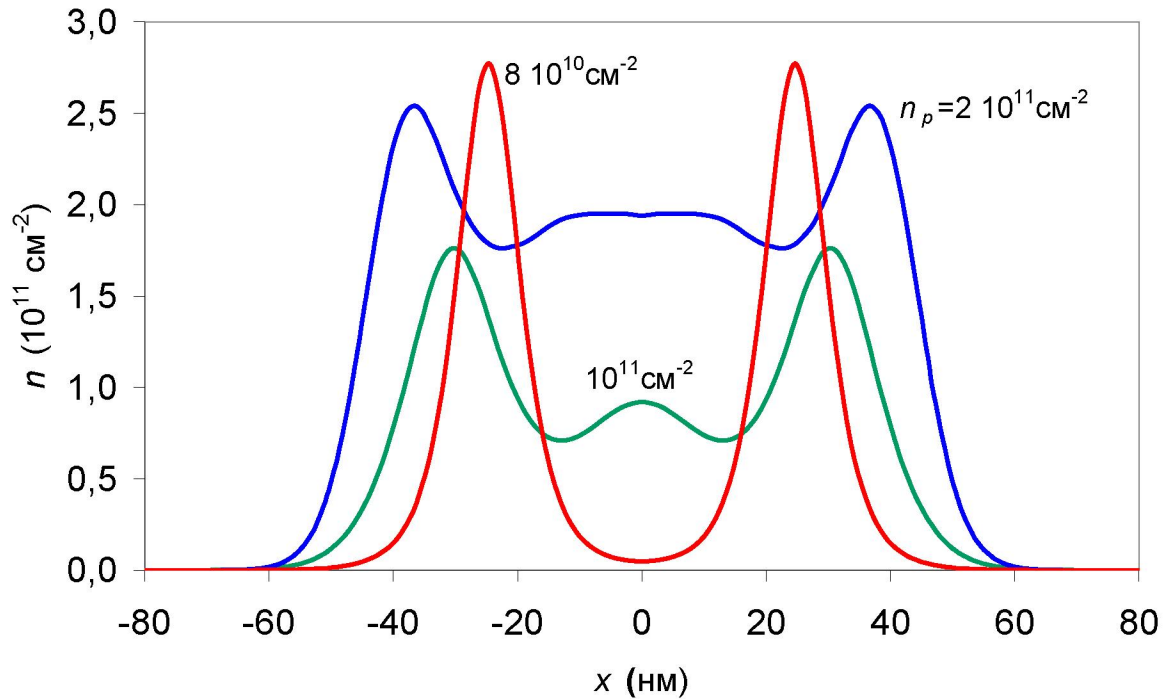


Рисунок 5.6 – Профили плотностей электронов при  $a = 100$  нм для различных значений  $n_p$

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решалась численно при  $n_p 2\pi L^2 = 1$  (для макроскопической системы это условие соответствует фактору заполнения  $\nu = 1$ ). Результаты расчетов для GaAs квантовой проволоки приведены на рисунке 5.6. Видно, что при низких плотностях электронная плотность имеет два максимума и в центре квантовой проволоки она практически равна нулю. В этом случае квантовая проволока разбивается на две туннельно-связанные проволоки. Этот эффект связан с увеличением роли обменного взаимодействия при понижении плотности электронов. С увеличением  $n_p$  плотность электронов отличается от  $n_p$  только вблизи границы квантовой проволоки. Проведенные вычисления для различных  $a$  показали, что с уменьшением  $a$  электронная плотность имеет один максимум (например, для  $n_p = 10^{11} \text{ см}^{-2}$  это происходит при  $a < 56$  нм).

### 5.3 Стабильность электронно-дырочной жидкости в квантовой проволоке

Хорошо известно, что в объемных полупроводниках и квантовых ямах экситоны могут конденсироваться в металлическую ЭДЖ. Менее изучены свойства квазиодномерной ЭДЖ. Образование электронно-дырочной плазмы в полупроводниковых квантовых проволоках показано в работах [164, 165]. Впервые в работе [166] экспериментально показана возможность образования ЭДЖ в InAs квантовых проволоках. Спектральный анализ линии излучения ЭДЖ позволил определить равновесную плотность электронно-дырочных пар, которая изменяется от  $2,5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$  до  $3,0 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ .

Вычислим энергию и равновесную плотность электронно-дырочных пар в квантовой проволоке [167]. Возьмем проволоку с сечением в виде круга и используем цилиндрическую систему координат. Вдоль оси  $z$  электроны и дырки движутся свободно. Для простоты считаем эффективные массы дырок и электронов изотропными. При сильном перекрытии волновых функций электронов и дырок кулоновской энергией можно пренебречь. В рамках теории функционала плотности полная энергия квазиодномерных электронов и дырок запишется в виде:

$$E_i[n_e, n_h] = T_e[n_e] + T_h[n_h] + \int U_e(r)n_e(r)2\pi r dr + \int U_h(r)n_h(r)2\pi r dr + \int (\varepsilon_{xc,e}n_e + \varepsilon_{xc,h}n_h)2\pi r dr, \quad (5.20)$$

где  $T_e$ ,  $T_h$  – кинетические энергии носителей заряда,  $\varepsilon_{xc}$  – обменно-корреляционная энергия,  $U_e(r)$ ,  $U_h(r)$  – внешние удерживающие потенциалы для электронов и дырок,  $n_e$  и  $n_h$  – плотности электронов и дырок.

В экситонной системе единиц уравнения Шредингера для электронов и дырок запишутся:

$$\left( -\frac{\mu}{m_i} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V_{\text{eff},i}(r) \right) \right) \psi_i(r) = E_i \psi_i(r), \quad (5.21)$$

где  $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$  – приведенная масса электрона и дырки,  $V_{eff,e}(r) = V_{xc,e}(r) + U_e(r)$ ,  $V_{eff,h}(r) = V_{xc,h}(r) + U_h(r)$ ,  $m_e$  и  $m_h$  – эффективные массы носителей заряда,  $i = e, h$

Считаем, что заполнен только нижний уровень размерного квантования, тогда плотности носителей задаются выражениями:

$$n_e(r) = N_e \psi_e^2(r), \quad n_h(r) = N_h \psi_h^2(r), \quad (5.22)$$

где  $N_e, N_h$  – одномерные плотности электронов и дырок, соответственно.

Для электронейтральной ЭДЖ  $N_e = N_h = N$ . Считаем удерживающие потенциалы слабыми и в дальнейшем их вклад в полную энергию учитываться не будет.

Кинетическая энергия запишется в следующем виде:

$$T_i[n_i] = \frac{\pi^2 \mu}{12 g_i^2 m_i} N_i^3 + N_i (E_i - \int V_{xc,i}(r) \psi_i^2(r) 2\pi r dr), \quad (5.23)$$

где  $g_i$  – число эквивалентных долин.

В выражении (5.23) первое слагаемое соответствует полной кинетической энергии носителей вдоль квантовой проволоки, а второе – кинетической энергии поперек квантовой проволоки.

Как и в разделе 2.1 возьмем  $\varepsilon_{xc,i} = -0,91K / r_{s,i}$ , где  $r_{s,i} = (3/4\pi n_i)^{1/3}$ ,  $K = 1,3$ . Тогда обменно-корреляционный потенциал запишется как  $V_{xc,i}(z) = -4\alpha n_i^{1/3}/3$ , где  $\alpha = 1,45K$ .

Для решения уравнения Шредингера используем приближенный метод, предложенный в работе [74]. Для каждого типа носителей заряда возьмем волновую функцию с параметром  $b_i$  в виде

$$\psi_i(z) = \exp(-r^2 / (2b_i^2)) / (\pi^{1/2} b_i). \quad (5.24)$$

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

$$b_i = \left( \frac{9\mu}{4\alpha m_i} \right)^{3/4} \frac{\pi^{1/4}}{N^{1/4}}, \quad (5.25)$$

Подставляя плотности носителей заряда в уравнение (5.20) и используя выражения (5.22)-(5.25) получаем энергию на одну электронно-дырочную пару:

$$E_{eh} = \frac{\pi^2 \mu}{12g_e^2 m_e} N_e^2 + \frac{\pi^2 \mu}{12g_h^2 m_h} N_h^2 - \frac{2\alpha^{3/2} m_e^{1/2}}{3\pi^{1/2} \mu^{1/2}} N_e^{1/2} - \frac{2\alpha^{3/2} m_h^{1/2}}{3\pi^{1/2} \mu^{1/2}} N_h^{1/2}. \quad (5.26)$$

В выражении (5.26) первые два слагаемые соответствуют продольной кинетической энергии, последние два слагаемые – сумме обменной и поперечной кинетической энергии электронов и дырок, соответственно.

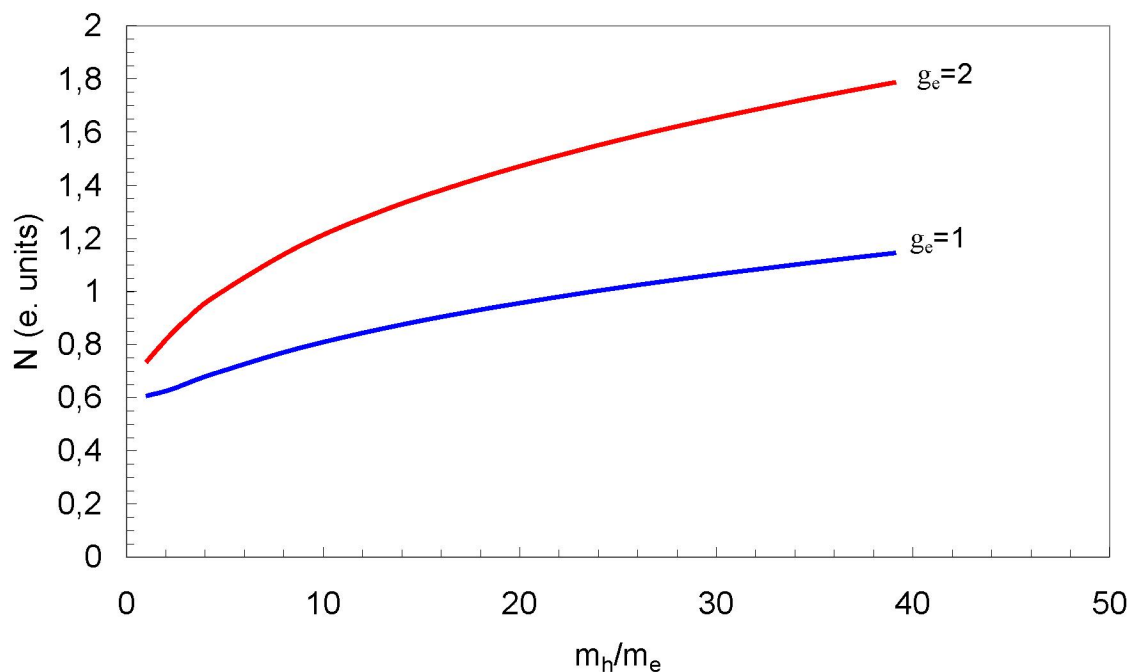


Рисунок 5.7 – Зависимость равновесной плотности от отношения масс

Отметим, что  $E_{eh}$  зависит от отношения масс  $m_h/m_e$ . Равновесная плотность электронно-дырочных пар находится из минимума энергии (5.26). На рисунке 5.7 приведены зависимости равновесной плотности и энергии на одну электронно-дырочную пару от отношения масс  $m_h/m_e$  при  $g_h = 1$ . Видно, что при равных массах электрона и дырки экситоны являются основным состоянием. С увеличением отношения  $m_h/m_e$  энергия  $E_{eh}$  уменьшается и основным состоянием будет ЭДЖ (рисунок 5.8). Из результатов представленных на рисунке 5.8 видно, что энергия связи

электронно-дырочных пар может достигать  $2Ry_{ex}$ . Такое значение энергии связи является рекордным для ЭДЖ. Как правило, энергия связи трехмерной и двумерной ЭДЖ меньше  $Ry_{ex}$ . Для InAs отношение  $m_h/m_e = 17,8$  и из результатов, представленных на рисунке 5.7, получаем  $N = 0,93$  ( $3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ ), что очень хорошо согласуется с результатом эксперимента [166]. Отметим, что с увеличением числа долин энергия связи и равновесная плотность ЭДЖ увеличиваются.

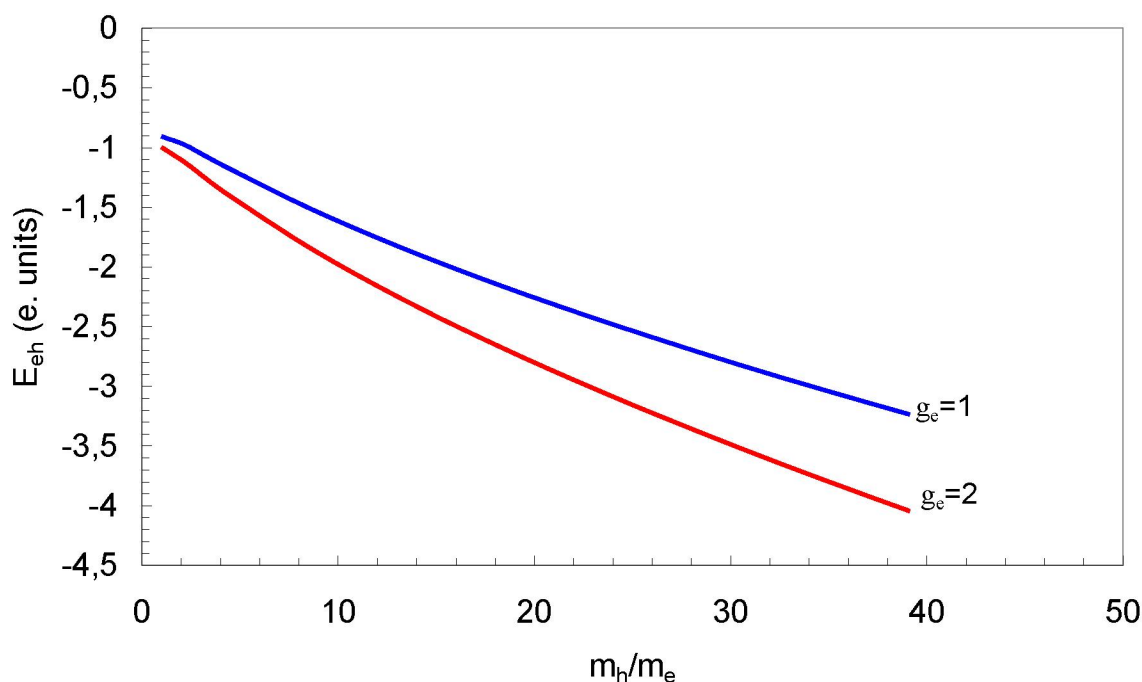


Рисунок 5.8 – Зависимость энергии на одну электронно-дырочную пару от отношения масс

#### 5.4 Основные выводы

В этой главе для изучения электронной структуры квантовых проволок использовалась теория функционала плотности. Численно и приближенно аналитически решались уравнения Кона-Шэма.

Использовалась теория функционала плотности для изучения перехода в спин-поляризованное состояние одномерных электронов в нулевом магнитном поле. Создан и реализован на ЭВМ новый эффективный алгоритм решения нелинейной системы уравнений Кона-



Шэма для квантовых проволок. Вычислены полные энергии спин-поляризованных и неполяризованных электронов. Построена фазовая диаграмма перехода в спин-поляризованное состояние. Показано, что для квантовых проволок значение одномерной критической плотности 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. Изучено влияние геометрии квантовой проволоки на переход в поляризованное состояние. Для квантовой проволоки с сечением в виде круга полученная величина критической плотности близка к критической плотности, полученной для квантовой проволоки с поперечным сечением в виде отрезка.

Показано, что при низкой плотности электронов кулоновский потенциал дает значительно меньший вклад в эффективный потенциал, чем обменный. В этом случае ожидалось, что профиль плотности электронов поперек квантовой проволоки будет иметь несколько максимумов. Однако, проведенные расчеты для широких областей ширины квантовой проволоки и плотности электронов показали, что плотность электронов имеет один максимум.

Показано, что в сильном магнитном поле для широкой квантовой проволоки при низких плотностях электронная плотность имеет два максимума и в центре квантовой проволоки она практически равна нулю. В этом случае квантовая проволока разбивается на две туннельно-связанные проволоки. Этот эффект связан с увеличением роли обменного взаимодействия при понижении плотности электронов.

Для электронно-дырочной жидкости в квантовой проволоке получено аналитическое выражение для энергии на одну электронно-дырочную пару. Получены зависимости равновесной плотности и энергии на одну электронно-дырочную пару от отношения масс дырки к электрону. При

равных массах электрона и дырки экситоны являются основным состоянием. С увеличением отношения масс  $m_h/m_e$  и увеличением числа долин энергия на одну электронно-дырочную пару уменьшается и основным состоянием будет ЭДЖ. Для InAs квантовой проволоки получена величина равновесной плотности  $N = 0,93 (3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1})$ , что очень хорошо согласуется с результатом эксперимента.

## Заключение

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 сокращений**

ЭДЖ электронно-дырочная жидкость

ТФП теория функционала плотности

КХС квантовое холловское состояние

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ**

1. P. Hohenberg, W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* – 1964.– V. 136. – P. B864-B871.
2. Н. Марч, В. Кон, П. Вашишта, С. Лундквист, Теория неоднородного электронного газа // М.: Мир, 1987.
3. А.Г. Шкловский, А.В. Береговой, Теория функционала электронной плотности для атомов и простых молекул // Белгород: ИД «Белгород» НИУ «БелГУ», 2014.
4. W. Kohn, L.J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* – 1965.– V. 140. – P. A1133-A1138.
5. O. Gunnarsson, J. Harris, R.O. Jones, Density functional theory and molecular bonding. I. First-row diatomic molecules // *J. Chem. Phys.* – 1997.– V. 67. – P. 3970.
6. А. В. Береговой, А. А. Плесканев, А. Г. Шкловский, Приближение локального функционала плотности с обменно-корреляционной энергии для релятивистских атомов // *Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика. Физика.* – 2012. – Т. 29, № 23. – С. 17-42.
7. С. Фудзинага, Метод молекулярных орбиталей // М.: Мир, 1983.
8. А. П. Бабичев, И. А. Бабушкина, А. М. Братковский, Физические величины // М.: Энергоатомиздат, 1991.
9. S.M. Reimann, M. Manninen, Electronic structure of quantum dots // *Rev. Mod. Phys.* – 2002. – V. 74. – P. 1283-1342.
10. P.A. Maksym, T. Chakraborty, Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions // *Phys. Rev. Lett.* – 1990. – V. 65. – P. 108-111.
11. P.A. Maksym, T. Chakraborty, Effect of electron-electron interactions on the magnetization of quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V.45. – P. 1947-1950.
12. P.A. Maksym, Magic number ground states of quantum dots in a magnetic field // *Physica B.* – 1993.–V. 184. – P. 385-393.

13. 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.
14. C. Yannouleas , U. Landman, Trial wave functions with long-range Coulomb correlations for two-dimensional N-electron systems in high magnetic fields // *Phys. Rev. B* – 2002.– V. 66. – P. 115315-115319.
15. C. Yannouleas, U. Landman, Two-dimensional quantum dots in high magnetic fields: Rotating-electron-molecule versus composite-fermion approach // *Phys. Rev. B.* – 2003.– V. 68. – P. 035326-1-035326-11.
16. M. Koskinen, M. Manninen, B. Mottelson, S.M. Reimann, Rotational and vibrational spectra of quantum rings // *Phys. Rev. B.* – 2001.– V. 63. – P. 205323-205327.
17. T. Seki , Y. Kuramoto, T. Nishino, Origin of Magic Angular Momentum in a quantum Dot under Strong Magnetic Field // *Journal of Phys. Soc. of Japan.* – 1996.– V. 65. – P. 3945-3951.
18. Y. Sidor, B. Partoens, F.M. Peeters, N. Schildermans, M. Hayne, V.V. Moshchalkov, A. Rastelli, O.G. Schmidt, High-field magnetoexcitons in unstrained GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 2006.– V. 73. – P. 155334-1-155334-8.
19. L.V. Butov, A.C. Gossard, D.S. Chemla, Macroscopically ordered state in an exciton system // *Nature.* – 2002.– V. 418. – P. 751-754.
20. A.S. Bracker, E.A. Stinaff, D. Gammon, M.E. Ware, J.G. Tischler, D. Park, D. Gershoni, A.V. Filinov, M. Bonitz, F.M. Peeters, C. Riva, Binding energies of positive and negative trions: From quantum wells to quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 2005.– V. 72. – P. 035332-1-035332-6.
21. E. Anisimovas, F.M. Peeters, Excitonic trions in vertically coupled quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 2003.– 68. – P. 115310-1-115310-9.
22. A.A. Vasilchenko, D. M. Tolkachev, Magic numbers and persistent current oscillations in electron-hole quantum dots // *Mod. Phys. Lett. B.* – 2016.– V. 30. – P. 1650013-1-1650013-6.



23. K. Kärkkäinen, M. Koskinen, M. Manninen, S.M. Reimann, Electron hole bilayer quantum dots: phase diagram and exciton localization // *Solid State Communications*. – 2004. – V. 130. – P. 187-191.
24. П.Д. Алтухов, А.В. Иванов, Ю.Н. Ломасов, А.А. Рогачев, Рекомбинационное излучение неравновесных электронно-дырочных пар, связанных со слоем поверхностного заряда в кремнии // *Письма в ЖЭТФ*. – 1983. – Т. 38. – С. 5-8.
25. П.Д. Алтухов, А.В. Иванов, Ю.Н. Ломасов, А.А. Рогачев, Двумерная электронно-дырочная система на поверхности кремния // *Письма в ЖЭТФ*. – 1984. – Т. 39. – С. 432-435.
26. N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery, F. Fournel, N. Magnea, Two-dimensional electron-hole liquid in single Si quantum wells with large electronic and dielectronic confinement // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 92. – P. 236802-1-236802-4
27. N. Pauc, V. Calvo, J. Eymery, F. Fournel, N. Magnea, Electronic and optical properties of Si/SiO<sub>2</sub> nanostructures. II. Electron-hole recombination at the Si/SiO<sub>2</sub> quantum-well–quantum-dot transition. // *Phys. Rev.* – 2005. – V. 72. – P. 205324-1-205324-13.
28. V.V. Zaitsev, V.S. Bagaev, T.M. Burbaev, V.S. Krivobok, A.V. Novikov, E.E. Onishchenko, Cooperative effects in SiGe/Si quantum wells // *Physica E: Low-dimensional systems and nanostructures*. – 2008. – V. 40, P. 1172-1174.
29. В.С. Багаев, В.В. Зайцев, В.С. Кривобок, Д.Н. Лобанов, С.Н. Николаев, А.В. Новиков, Е.Е. Онищенко, Каналы излучательной рекомбинации и фазовые переходы в системе неравновесных носителей в тонкой квантовой яме Si<sub>0.93</sub>Ge<sub>0.07</sub>/Si // *ЖЭТФ*. – 2008. – Т. 134. – С. 988-995.
30. V. S. Bagaev, V.S. Krivobok, S.N. Nikolaev, A.V. Novikov, E.E. Onishchenko, M. L. Skorikov, Observation of the electron-hole liquid in Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>/Si quantum wells by steady-state and time-resolved photoluminescence measurements // *Phys. Rev.* – 2010. – V. 82. – P. 115313.

31. 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.
32. В.С. Багаев, В.С. Кривобок, С.Н. Николаев, Е.Е. Онищенко, А.А. Пручкина, Д.Ф. Аминев, М.Л. Скориков, Д.Н. Лобанов, А.В. Новиков, Динамика фазовых переходов в системе неравновесных носителей заряда в квантоворазмерных структурах  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$  // ЖЭТФ – 2013. – Т. 144. – С. 1045-1060.
33. 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 // Письма в ЖЭТФ – 2016. – Т. 104. – С. 161 -166.
34. 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 // B. Russ. Acad. Sci.: Phys.. – 2018. – V. 82. – P. 427-430.
35. M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, S. Pinhas, Generalized many-channel conductance formula with application to small rings // Phys. Rev. B. – 1985. – V. 31. – P. 6207-6215.
36. M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, Josephson behavior in small normal one-dimensional rings // Physics Letters A. – 1983. – V. 96. – P. 365-367.
37. B. Reulet, H. Bouchiat, Ac conductivity of mesoscopic rings: The discrete-spectrum limit // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – P. 2259.
38. F. Marchesoni, Persistent currents in mesoscopic rings: A stochastic model // Journal of Statistical Physics. – 1993. – V. 70. – P. 247-251.
39. E.K. Riedel, F. von Oppen, Mesoscopic persistent current in small rings // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 47. – P. 15449.

40. E.M.Q. Jariwala, P. Mohanty, M.B. Ketchen, R.A. Webb, Diamagnetic Persistent Current in Diffusive Normal-Metal Rings // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – V. 86. – P. 1594.
41. H. Bary-Soroker, O. Entin-Wohlman, Y. Imry, Persistent currents of noninteracting electrons in one-, two-, and three-dimensional thin rings // *Phys. Rev. B.* – 2010.– V. 82. – P. 144202.
42. H. Bluhm, N.C. Koshnick, J.A. Bert, M.E. Huber, K.A. Moler, Persistent Currents in Normal Metal Rings // *Phys. Rev. Lett.* – 2009.– V. 102. – P. 136802.
43. A.C. Bleszynski-Jayich, W. E. Shanks, B. Peaudecerf, E. Ginossar, F. von Oppen, L. Glazman, J.G.E. Harris, Persistent Currents in Normal Metal Rings // *Science.* – 2009.– V. 326. – P. 272-275.
44. V. Chandrasekhar, R.A. Webb, M.J. Brady, M.B. Ketchen, W.J. Gallagher, A. Kleinsasser, Magnetic response of a single, isolated gold loop // *Phys. Rev. Lett.* – 1991.– V. 67. – P. 3578.
45. E.M.Q. Jariwala, P. Mohanty, M.B. Ketchen, R.A. Webb, Diamagnetic Persistent Current in Diffusive Normal-Metal Rings // *Phys. Rev. Lett.* – 2001.– V. 86. – P. 1594.
46. H. Bluhm, N.C. Koshnick, J.A. Bert, M.E. Huber, K.A. Moler, Persistent Currents in Normal Metal Rings // *Phys. Rev. Lett.* – 2009.– V. 102. – P. 136802.
47. V.M. Fomin, V.N. Gladilin, S.N. Klimin, J.T. Devreese, N.A.J.M. Kleemans, P.M. Koenraad, Theory of electron energy spectrum and Aharonov-Bohm effect in self-assembled  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum rings in GaAs // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 235320.
48. V.M. Fomin, V.N. Gladilin, J.T. Devreese, N.A. J. M. Kleemans, P.M. Koenraad, Energy spectra and oscillatory magnetization of two-electron self-assembled  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum rings in GaAs // *Phys. Rev. B.* – 2008. – V. 77. – P. 205326 .

49. 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.
50. L.L. Li, D. Moldovan, P. Vasilopoulos, F.M. Peeters, Aharonov-Bohm oscillations in phosphorene quantum rings // Phys. Rev. B. – 2017.– V. 95. – P. 205426.
51. R. Deblock, R. Bel, B. Reulet, H. Bouchiat, D. Mailly, Diamagnetic Orbital Response of Mesoscopic Silver Rings // Phys. Rev. Lett. – 2002.– V. 89. – P. 206803.
52. D. Mailly, C. Chapelier, A. Benoit, Experimental observation of persistent currents in GaAs-AlGaAs single loop // Phys. Rev. Lett. – 1993.– V. 70. – P. 2020.
53. N.A.J.M. Kleemans, I.M.A. Bominaar-Silkens, V.M. Fomin, V.N. Gladilin, D. Granados, A.G. Taboada, J.M. García, P. Offermans, U. Zeitler, P.C.M. Christianen, J.C. Maan, J.T. Devreese, P.M. Koenraad, Oscillatory Persistent Currents in Self-Assembled Quantum Rings // Phys. Rev. Lett. – 2007.– V. 99. – P. 146808.
54. S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, M. D'Iorio, Possible metal-insulator transition at  $B=0$  in two dimensions // Phys. Rev. B. – 1994.– V. 50. – P. 8039.
55. S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, M. D'Iorio, Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in silicon at  $B=0$  // Phys. Rev. B. – 1995.– V. 51. – P. 7038.
56. S.V. Kravchenko, M.P. Sarachik, Metal-insulator transition in two-dimensional electron systems // Rep. Prog. Phys. – 2004.– V. 67. – P. 1
57. Е.Л. Шангина, В.Т. Долгополов, Квантовые фазовые переходы в двумерных системах // УФН – 2003.– Т. 173, С. 801-812.

58. А.А. Шашкин, Переходы металл-диэлектрик и эффекты электрон-электронного взаимодействия в двумерных электронных системах // УФН. – 2005. – Т. 175, С. 139-161.
59. D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, I. S. Burmistrov, Critical behavior of transport and magnetotransport in 2D electron system in Si in the vicinity of the metal-insulator transition // JETP Letters. – 2006. – V. 84. – P. 780-784.
60. D. A. Knyazev, O. E. Omel'yanovskii, V. M. Pudalov, and I. S. Burmistrov, Metal-Insulator Transition in Two Dimensions: Experimental Test of the Two-Parameter Scaling // Phys. Rev. Lett. – 2008. – V. 100. – P. 046405.
61. V.M. Pudalov, M. D'Iorio, J.W. Campbell, Hall resistance and quantized Hall effect to insulator transitions in a 2D electron system // JETP Letters. – 1993. – V. 57, P. 592-595.
62. 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.
63. 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.
64. M. Kellogg, J.P. Eisenstein, L.N. Pfeiffer, K.W. West, Vanishing Hall Resistance at High Magnetic Field in a Double-Layer Two-Dimensional Electron System // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 93. – P. 036801.
65. E. Tutuc, M. Shayegan, D.A. Huse, Counterflow Measurements in Strongly Correlated GaAs Hole Bilayers: Evidence for Electron-Hole Pairing // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 93. – P. 036802.
66. J.P. Eisenstein, A.H. MacDonald, Bose–Einstein condensation of excitons in bilayer electron systems // Nature – London. – 2004. – V. 432. – P. 691-694.
67. A.D.K. Finck, J.P. Eisenstein, L.N. Pfeiffer, K.W. West, Quantum Hall Exciton Condensation at Full Spin Polarization // Phys. Rev. Lett. – 2010. – V. 104. – P. 016801.

68. Электронно-дырочные капли в полупроводниках, под ред. Джеффриса К.Д., Келдыша Л.В. // Москва: Наука, 1988.
69. N.N. Sibeldin, in Problems of Condensed Matter Physics: Quantum Coherence Phenomena in Electron-Hole and Coupled Matter-Light Systems, ed. by Ivanov A.L., and Tikhodeev S.G. // Oxford Univ. Press. – 2008.– V. 139. – P. 227.
70. P. Vashishta, R.K. Kalia, Universal behavior of exchange-correlation energy in electron-hole liquid // Phys. Rev B. – 1982.– V. 25 . – P. 6492-6495.
71. 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.
72. В.С. Багаев, В.С. Кривобок, В.П. Мартовицкий, А.В. Новиков, Распределение германия в слоях  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x < 0.1$ ), выращенных на подложке  $\text{Si}(001)$ , в зависимости от их толщины // ЖЭТФ. – 2009.– Т. 136. – С. 1154-1169.
73. C. Penn, F. Schäffler, G. Bauer, S. Glutsch, Application of numerical exciton-wave-function calculations to the question of band alignment in  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells // Phys. Rev. B, V. 59 – 1999.– P. 13314.
74. A.A. Vasilchenko, Spontaneous spin polarization in quantum wires // Physics Letters A – 2015.– V. 378. – P. 3013-3015.
75. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, В.С. Кривобок, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в мелких  $\text{SiGe}/\text{Si}$  квантовых ямах // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018.– Т. 61, №2. – С. 3-7.
76. C. Penn, F. Schäffler, G. Bauer, S. Glutsch, Application of numerical exciton-wave-function calculations to the question of band alignment in  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum wells // Phys. Rev. B. – 1999.– V. 59. – P. 13314.
77. L. Yang, J.R. Watling, R.C.W. Wilkins, M. Borici, J.R. Barker, A. Asenov, S. Roy,  $\text{Si}/\text{SiGe}$  heterostructure parameters for device simulations // Semicond. Sci. Technol. – 2004.– V. 19. – P. 1174

78. R.K. Kalia, P. Vashishta, Surface structure of electron-hole drops in germanium and silicon // *Phys. Rev.* – 1978.– V. 17. – P. 2655-2672.
79. G. Kirczenow, K.S. Singwi, Study of the phase diagrams of the two-component electron-hole liquid in stressed germanium // *Phys. Rev.* – 1979.– V. 20. – P. 4171.
80. 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.
81. А.А. Васильченко, Многокомпонентная электронно-дырочная жидкость в Si/SiGe квантовых ямах // *Письма в ЖЭТФ.* 2018.– Т. 108. – С. 185–188.
82. А.А. 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.
83. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Квазидвумерная электронно-дырочная жидкость в Si/SiO<sub>2</sub> квантовых ямах // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2018. – Т. 61, №3. – С. 52-56.
84. Н.Н. Сибельдин, Электронно-дырочная жидкость в низкоразмерных кремний-германиевых гетероструктурах // *ЖЭТФ.* – 2016. – Т. 149. – С. 678-694.
85. Н.Н Сибельдин, Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках и низкоразмерных структурах // *УФН* – 2017.– Т. 187. – С. 1236-1270.
86. N.N. Sibeldin, A.L. Ivanov, S.G. Tikhodeev, Problems of Condensed Matter Physics: Quantum Coherence Phenomena in Electron-Hole and Coupled Matter-Light Systems // *Oxford Univ. Press.* – 2008. – V. 139, P. 227.
87. H. L. Störmer, R. W. Martin, Magnetoluminescence of the electron-hole liquid in germanium // *Phys. Rev. B.* – 1979. – V. 20. – P. 4213-4236.
88. Kavetskaya I.V., Zamkovets N.V., Sibeldin N.N. and Tsvetkov V.A. //

JETP. – 1997. – V. 84. – P. 406.

89. K. Alberi, B. Fluegel, S. A. Crooker, A. Mascarenhas, Magnetic field stabilized electron-hole liquid in indirect-band-gap  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 93. – P. 075310.

90. В.Б. Тимофеев, А.В. Черненко, Стабилизация электронно-дырочной жидкости в одноосно деформированном германии в сильном магнитном поле // ЖЭТФ. – 1997. – Т. 112. – С. 1091-1105.

91. Н.Н. Сибельдин, Магнитостабилизированные многочастичные связанные состояния в полупроводниках // УФН. – 2003. – Т. 173. – С. 999-1008.

92. Л.В. Келдыш, Т.А. Онищенко, Электронная жидкость в сверхсильном магнитном поле // Письма в ЖЭТФ. – 1976. – Т. 24. – С. 70-72.

93. 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.

94. 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.

95. M.A. Vouk, Conditions necessary for the formation of the electron-hole liquid in diamond and calculation of its parameters // J. Phys. C. – 1979. – V. 12. – P. 2305-2312.

96. K. Thonke, R. Schliesing, N. Teofilov, H. Zacharias, R. Sauer, A. M. Zaitsev, H. Kanda, T. R. Anthony, Electron-hole drops in synthetic diamond // Diam. Relat. Mater. – 2000. – V. 9, P. 428-431.

97. R. Sauer, N. Teofilov, K. Thonke, Exciton condensation in diamond // Diam. Relat. Mater. – 2004. – V. 13. – P. 691-699.

98. M. Kozak, F. Trojánek, T. Popelar, P. Maly, Dynamics of electron-hole liquid condensation in CVD diamond studied by femtosecond pump and probe spectroscopy // Diam. Relat. Mater. – 2013. – V. 34. – P. 13-18.



99. T. Popelář, F. Trojánek, M. Kozák, P. Malý, Dynamics of photoexcited carriers in CVD diamond studied by mid-infrared femtosecond spectroscopy // *Diam. Relat. Mater.* – 2017. – V. 71. – P. 13-19.
100. 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.
101. M. Nagai, R. Shimano, K. Horiuchi, M. Kuwata-Gonokami, Phase diagram of the quantum degenerate electron–hole system in diamond // *Physica Status Solidi B.* 509 – 2003. – V. 238. – P. 509-512.
102. N. Naka, J. Omachi, M. Kuwata-Gonokami, Suppressed formation of electron-hole droplets in diamond under a strain field // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 193202.
103. E.I. Lipatov, D.E. Genin, V.F. Tarasenko, Recombination Radiation in Synthetic and Natural Diamonds Exposed to Pulsed UV Laser Radiation // *Russ. Phys. J.* – 2015. – V. 58. – P. 911-922.
104. Y. Sakamoto, K. Murayama, Y. Nishioka, H. Okushi, Excitation density dependence of luminescence spectrum of electron-hole plasma in diamond // *Diam. Relat. Mater.* – 2009. – V. 18. – P. 759-763.
105. E.I. Lipatov, D.E. Genin, V.F. Tarasenko, Pulsed photoconductivity in diamond upon quasi-continuous laser excitation at 222 NM at the formation of an electron–hole liquid // *JETP Lett.* – 2016. – V. 103. – P. 663-668.
106. M. Kozak, F. Trojánek, T. Popelář, P. Malý, Control of condensation and evaporation of electron–hole liquid in diamond by femtosecond laser pulses // *Phys. Status Solidi RRL.* – 2013. – V. 7, №4. – P. 278-281.
107. А.А. Васильченко, Г.Ф. Копытов, Высокотемпературная электронно-дырочная жидкость в пленках алмаза // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2018. – Т. 61 №7. – С. 158-159.
108. M. Willatzen, M. Cardona, N.E. Christensen, Linear muffin-tin-orbital and  $k \cdot p$  calculations of effective masses and band structure of semiconducting diamond // *Phys. Rev. B.* – 1994. – V. 50. – P. 18054.

109. 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.
110. A.A.Vasilchenko, High-temperature electron-hole liquid in diamond films // *Diam. Relat. Mater.* – 2019. – V. 97. – P. 107454.
111. T.L. Reinecke, S.C. Ying, Scaling Relations for Electron-Hole-Droplet Condensation in Semiconductors // *Phys. Rev. Lett.* – 1979.– V. 43. – P. 1054
112. 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.
113. А.А. Васильченко, Н.А. Яковенко, Электронная структура квантовой точки в сильном магнитном поле // *Инженерная физика.* – 2008. – №5. – С. 2-4.
114. 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.
115. А.А. Васильченко, А.В. Бунякин, Осцилляции незатухающего тока в квантовых точках, XIX Уральская международная зимняя школа по физике полупроводников, Екатеринбург – 2012.
116. 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.
117. 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.
118. 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.

119. F. Stern, W.E. Howard, Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit // *Phys. Rev.* – 1967. – V. 163. – P. 816-835.

120. A.L. Fetter, Electrodynamics of a layered electron gas. I. Single layer // *Ann. Phys.* – N.Y. – 1973. – V. 81. – P. 367-393.

121. N. J. M. Horing, H. C. Tso, G. Gumbs, Fast-particle energy loss in the vicinity of a two-dimensional plasma // *Phys. Rev. B.* – 1987. – V. 36. – P. 1588-1594.

122. V. Gudmundsson, Oscillating impurity spectra caused by non-linear screening in the quantum hall regime // *Solid State Commun.* – 1990.– V. 74. – P. 63-67.

123. E. Zaremba, I. Nagy, P. M. Echenique, Nonlinear Screening in Two-Dimensional Electron Gases // *Phys. Rev. Lett.* – 2003.– V. 90. – P. 046801.

124. E. Zaremba, I. Nagy, a P. M. Echenique, Nonlinear screening and stopping power in two-dimensional electron gases // *Phys. Rev. B.* – 2005.– V. 71. – P. 125323.

125. I. J.J. Palacios, P. Hawrylak, Correlated few-electron states in vertical double-quantum-dot systems // *Phys. Rev. B.* – 1995.– V. 51. – P. 1769-1777.

126. H. Imamura, P.A. Maksym, H. Aoki, Magic numbers and optical-absorption spectrum in vertically coupled quantum dots in the fractional quantum Hall regime // *Phys. Rev. B*, V. 53. – 1996.– P. 12613-12616.

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

128. W.G. van der Wiel, S. De Franceschi, J.M. Elzerman, T. Fujisawa, S. Tarucha, L.P. Kouwenhoven, Electron transport through double quantum dots // *Rev. Mod. Phys.* – 2002.– V. 75. – P. 1-33.

129. R. Hanson, L.P. Kouwenhoven, J.R. Petta, S. Tarucha, L.M.K. Vandersypen, Spins in few-electron quantum dots // *Rev. Mod. Phys.* – 2007. – V. 79. – P. 1217-1268.
130. T. Fujisawa, S. Tarucha, Multiple photon assisted tunneling between two coupled quantum dots // *Jpn. J. of App. Phys.* – 1997. – V. 36. – P. 4000-4003.
131. T. Fujisawa, S. Tarucha, Photon assisted tunnelling in single and coupled quantum dot systems // *Superlattices and Microstructures.* – 1997. – V. 21. – P. 247-254.
132. T.H. Oosterkamp, L.P. Kouwenhoven, A.E.A. Koolen, N.C. van der Vaart, C.J.P.M. Harmans, Photon Sidebands of the Ground State and First Excited State of a Quantum Dot // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 78. – P. 1536.
133. T.H. Oosterkamp, T. Fujisawa, W.G. van der Wiel, K. Ishibashi, R.V. Hijman, S. Tarucha, L.P. Kouwenhoven, Microwave spectroscopy of a quantum-dot molecule // *Nature.* – 1998. – V. 395. – P. 873-876 .
134. W.G. van der Wiel, T. Fujisawa, T.H. Oosterkamp, L.P. Kouwenhoven, Microwave spectroscopy of a double quantum dot in the low- and high-power regime // *Physica B.* – 1999.– V. 272. – P. 31-35.
135. H. Qin, A.W. Holleitner, K. Eberl, R.H. Blick, Coherent superposition of photon- and phonon-assisted tunneling in coupled quantum dots // *Phys. Rev. B.* – 2001.– V. 64. – P. 241302 – R.
136. M. Switkes, C.M. Marcus, K. Campman, A.C. Gossard, An adiabatic quantum electron pump // *Science.* – 1999.– V. 283. – P. 1905-1908.
137. B.B. Brandt, C. Yannouleas, U. Landman, Double-well ultracold-fermions computational microscopy: wave-function anatomy of attractive-pairing and wigner-molecule entanglement and natural orbitals // *Nano Lett.* – 2015.– V. 15, P 7105-7111.
138. А.А. Васильченко, Новые серии магических чисел для полного углового момента электронов в вертикально-связанных квантовых точках // *Инженерная физика.* – 2009. – №9. – С. 8-11.

139. А.А. Васильченко, Стабильность квантового холловского состояния в двойной квантовой точке // Инженерная физика. – 2011. – №1. – С. 19-22.
140. А.А. Васильченко, А.В. Бунякин, Влияние примесного потенциала на стабильность квантового холловского состояния в двойных квантовых точках // XII международная конференция Опто-, нано-электроника, нанотехнологии и микросистемы, Ульяновск. – 2010. – С. 141-142.
141. K.L. Janssens, B. Partoens, F.M. Peeters, Magnetoexcitons in planar type-II quantum dots in a perpendicular magnetic field // Phys. Rev. B. – 2001. – V.64. – P. 155324.
142. O. Mayrock, H.J. Wünsche, F. Henneberger, C. Riva, V.A. Schweigert, F.M. Peeters, Weak localization of biexcitons in quantum wells // Phys. Rev. B. – 1999. – V.60. – P. 5582-5589.
143. C. Riva, F.M. Peeters, K. Varga, Excitons and charged excitons in semiconductor quantum wells // Phys. Rev. B. – 2000. – V. 61. – P. 13873-13881.
144. A.V. Filinov, C. Riva, F.M. Peeters, Yu. E. Lozovik, M. Bonitz, Influence of well-width fluctuations on the binding energy of excitons, charged excitons, and biexcitons in GaAs-based quantum wells // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 035323.
145. A. Chaves, M.Z. Mayers, F.M. Peeters, D.R. Reichman, Theoretical investigation of electron-hole complexes in anisotropic two-dimensional materials // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 93. – P. 115314.
146. M. Szyniszewski, E. Mostaani, N.D. Drummond, V. I. Fal'ko, Binding energies of trions and biexcitons in two-dimensional semiconductors from diffusion quantum Monte Carlo calculations // Phys. Rev. B. – 2017.– V. 95. – P. 081301(R).
147. I.V. Bondarev, Configuration space method for calculating binding energies of exciton complexes in quasi-1D/2D semiconductors // Mod. Phys. Lett. B. – 2016. – V. 30. – P. 1630006-1- 1630006-23.

148. A.E. Almand-Hunter, H. Li, S.T. Cundiff, M. Mootz, M. Kira, S. W. Koch, Quantum droplets of electrons and holes // *Nature*. – 2014. – V. 506. P. 471-475.
149. A.A. Vasilchenko, Density functional theory of two-dimensional electron-hole complexes // *Modern Physics Letters B*. – 2019. – V. 33. – P. 1950152-1-1950152-6.
150. А.А. Васильченко, Теория функционала плотности двумерного электронно-дырочного комплекса // *Инженерная физика*. – 2012. – №2. – С. 3-5.
151. L.K. Castelano, G.-Q. Hai, B. Partoens, F.M. Peeters, Control of the persistent currents in two interacting quantum rings through the Coulomb interaction and interring tunneling // *Phys. Rev. B*. – 2008. – V. 78. – P. 195315.
152. E. Anisimovas, F.M. Peeters, Correlated few-particle states in artificial bipolar molecule // *Phys. Rev. B*. – 2002. – V. 65. – P. 233302.
153. D.A. Wharam, T.J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J.E.F. Frost, D.G. Hasko, D.C. Peacock, D.A. Ritchie, G.A.C. Jones, One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance // *J. Phys. C*. – 1988. – V. 21. – P. L209- L214.
154. B.J. van Wees, H.van Houten, C.W.J. Beenakker, J.G. Williamson, L.P. Kouwenhoven, D.van der Marel, C.T. Foxon, Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. Lett*. – 1988. – V. 60. – P. 848-852.
155. S.K. Maiti, M. Dey, S. Sil, A. Chakrabarti, S.N. Karmakar, Magneto-transport in a mesoscopic ring with Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions // *Europhys. Lett*. – 2011. – V. 95. – P. 57008-57014.
156. R. Crook, J. Prance, K.J. Thomas, S.J. Chorley, I. Farrer, D.A. Ritchie, M. Pepper, C.G. Smith, Conductance Quantization at a Half-Integer Plateau in a Symmetric GaAs Quantum Wire // *Science*. – 2006. – V. 312. – P. 1359-1362.
157. F.E. Orlenko, S.I. Chelkak, E.V. Orlenko, G.G. Zegrya, Effects of the reduction of the dimension of a system upon spin ordering in a degenerate electron gas // *JETP*. – 2010. – V. 110. – P. 805-812.

158. N.T. Bagraev, I.A. Shelykh, V.K. Ivanov, L.E. Klyachkin, Spin depolarization in quantum wires polarized spontaneously in zero magnetic field // *Phys. Rev. B.* – 2004. – V. 70. – P. 155315.
159. K. Yang, Ferromagnetic Transition in One-Dimensional Itinerant Electron Systems // *Phys. Rev. Lett.*, – 2004. – V. 93. – P. 06640.
160. C. K. Wang, K. F. Berggren, Local spin polarization in ballistic quantum point contacts // *Phys. Rev. B.* – 1998. – V. 57. – P. 4552-4556.
161. A. Ashok, R. Akis, D. Vasileska, D.K. Ferry, Spin polarization in GaAs/Al<sub>0.24</sub>Ga<sub>0.76</sub>As heterostructures // *Mol. Simulations.* – 2005. – V. 31. – P. 797-800.
162. B. Tanatar, D.M. Ceperley, Ground state of the two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39. – P. 5005-5016.
163. T. Guillet, R. Grousseau, V. Voliotis, X. L. Wang, M. Ogura, Local disorder and optical properties in V-shaped quantum wires: Toward one-dimensional exciton systems // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68. – P. 045319.
164. R. Ambigapathy, I. Bar-Joseph, D. Y. Oberli, S. Haacke, M. J. Brasil, F. Reinhardt, E. Kapon, B. Deveaud, Coulomb Correlation and Band Gap Renormalization at High Carrier Densities in Quantum Wires // *Phys. Rev. Lett.* – 1997. – V. 78. – P. 3579.
165. B. Alén, D. Fuster, G. Muñoz-Matutano, J. Martínez-Pastor, Y. González, J. Canet-Ferrer, L. González, Exciton Gas Compression and Metallic Condensation in a Single Semiconductor Quantum Wire // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – V. 101. – P. 067405.
166. 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.