

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Фізичний факультет

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М. Ліфшиця

«Допущено до захисту»

Оцінка « _____ »

Зав. кафедри теоретичної фізики
імені академіка І.М. Ліфшиця
доц. Рашба Г. І.

Голова ЕК Доктор фіз.-мат. наук, пров.
наук співр. ФТІНТ НАНУ С.І.
Шевченко.

_____ 2025 р.

_____ 2025 р.

Личман Олександр Володимирович

**Квантові осциляції великого термодинамічного потенціалу
електронного газу у квантовій точці з локальними станами електронів**

Кваліфікаційна робота
на здобуття освітнього ступеня
«магістр» за спеціальністю 104 –
«фізика та астрономія» освітньо-
професійна програма «фізика»

Науковий керівник – завідувач
кафедри теоретичної фізики імені
академіка І.М. Ліфшиця, ХНУ імені
В.Н. Каразіна, кандидат фіз.-мат.
наук, доцент Рашба Г.І

Рецензент – Доктор фіз.-мат. наук,
пров. наук співр. Інституту
монокристалів НАНУ
Філь Д.В.

Харків 2025

АНОТАЦІЯ

Розглянуто властивості квантової точки з домішковим атомом, обмеженої параболічним потенціалом конфайнменту в магнітному полі. Як модель квантової точки, обраний двовимірний електронний газ в магнітному полі, обмежений параболічним потенціалом конфайнменту. Припускається, що домішковий атом знаходиться в центрі квантової точки. Обчислено амплітуду розсіювання електронів домішкою, великий термодинамічний потенціал, намагніченість. Розглянуто розсіювання домішками локальних рівнів, відщеплення локальних рівнів від рівнів Ландау.

Ключові слова: квантова точка, домішка, двовимірний електронний газ, термодинамічні функції, потенціал конфайнменту, магнітне поле, потенціал домішки, розсіювання, локальні рівні.

ABSTRACT

Properties of quantum dots with an impurity atom in a magnetic field, confined by a parabolic confinement potential are considered. Two dimensional electron gas in a magnetic field, confined by a confinement potential was chosen as a quantum dot model. It is presumed that the impurity atom is located in the center of the quantum dot. Scattering amplitude of electrons by the impurity, grand thermodynamical potential, magnetization were calculated. Scatterings of localized levels by the impurity from the Landau levels were reviewed.

Key words: quantum dot, impurity, two dimensional electron gas, thermodynamical functions, confinement potential, magnetic field, impurity potential, scattering, localized levels.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	10
РОЗДІЛ 2.....	13
МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ ТА МОДЕЛЬ.....	13
2.1. Модель квантової точки	13
2.2. Модель домішкового потенціалу	13
2.3. Метод функції Гріна та рівняння Ліфшиця.....	14
РОЗДІЛ 3.....	15
Функціональний підхід у теорії домішкових станів електронів у наносистемах	15
РОЗДІЛ 4.....	23
Домішкові стани електронів у квантових точках у зовнішньому магнітному полі	23
4.1. Енергетичний спектр і густина станів бездомішкових квантових точок	23
4.2. Амплітуда розсіювання електронів у квантовій точці	24
РОЗДІЛ 5.....	33
Квантові осциляції термодинамічних величин електронного газу у квантовій точці з локальними станами електронів	33
ВИСНОВКИ	37
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	38

ВСТУП

Квантова точка — це система електронів у провіднику, які рухаються в обмеженому об'ємі нанометрового розміру. Проблема створення такої структури полягає в тому, щоб накласти на електрони провідності в провіднику додатковий потенціал (потенціал конфайнменту), який обмежує їх рух у всіх напрямках. Це досягається за допомогою спеціальної техніки молекулярно-променевої епітаксії. За допомогою цієї методики створюють наноструктури з одновимірним електронним газом: квантові дроти та нульвимірні структури розміром у кілька нанометрів, які називаються квантовими точками. Важливо підкреслити, що квантова точка розміром 10 нм містить близько 100 атомів по своєму діаметру, і хоча її внутрішня частина зберігає кристалічну симетрію об'ємного матеріалу, всі властивості цієї наноструктури сильно залежать від стану її поверхні.

Добре відомо [1], що енергетичний спектр електронів ізольованої квантової точки є набором дискретних розмірних рівнів квантування. Тому його можна розглядати як гігантський штучний атом з контрольованими параметрами, такими як глибина потенційної ями, природа утримуючого потенціалу, кількість електронів і розмір області їх локалізації.

Інтерес до квантових точок та інших наноструктур зумовлений низкою причин [1]. Вплив мікроелектроніки на суспільство постійно зростає. На досягненнях мікроелектроніки базуються успіхи обчислювальної техніки, інформатики, радіоелектроніки. Він становить елементну базу всіх сучасних пристроїв прийому, передачі та обробки інформації, автоматизованих систем управління. Прагнення зменшити розміри пристроїв, збільшити їх швидкість призвело до того, що фізика твердого тіла перетворилася на нанофізику — фізику наносистем. Ці системи цікаві не тільки тим, що вони є функціональними елементами сучасних гаджетів і пристроїв, але й тим, що вони демонструють квантові ефекти. Без використання квантової механіки неможливо передбачити властивості майбутніх технічних пристроїв.

Вивчення квантових ефектів у напівпровідникових наноструктурах дало поштовх до появи нових класів пристроїв: резонансних тунельних діодів, транзисторів, які мають високу швидкість відгуку та широкий діапазон можливостей. Інтенсивно обговорюються проблеми створення квантових інтегральних схем і квантових комп'ютерів, основними елементами яких будуть квантові точки, дроти, ями, нанотрубки.

Особливий інтерес становлять властивості наносистеми в магнітному полі. Наявність магнітного поля призводить до появи ефектів гібридизації розмірного і магнітного квантування руху електронів. Ці ефекти включають квантовий ефект Холла в двовимірному електронному газі.

Теоретики цікавляться квантовими точками, оскільки вони є зручними об'єктами для тестування нових методів обчислення. Особливий інтерес представляють властивості квантових точок з домішковими атомами в магнітному полі. Мала кількість електронів у квантовій точці призводить до того, що навіть один атом домішки сильно впливає на її властивості. В обмеженому обсязі квантової точки в магнітному полі проявляються цікаві ефекти гібридизації просторового і магнітного квантування руху електронів. Ці ефекти включають розглянуту тут локалізацію електронів на окремих атомах домішки.

Монографія [1] присвячена електронним і оптичним властивостям квантових точок та інших низькорозмірних напівпровідникових структур. У монографії розглядаються методи отримання квантових точок, способи реалізації їх утримання, нові типи оптоелектронних пристроїв, що містять квантові точки. Розглянуто квантові точки в системах з двовимірним електронним газом (2DEG) на межі GaAs-AlGaAs. Використовується параболічний конфайнмент Фока-Дарвіна [2, 3]. Магнітне поле перпендикулярно до площини 2DEG. Враховано вплив одного або кількох домішкових атомів у квантових точках, що розсіюють електрони. Автор Реф.

[1] обмежився розглядом домішкового відштовхувального потенціалу типу Гауса

$$V(\vec{r}) = V_0 \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{R})^2}{d^2}\right] \quad (V_0 > 0),$$

де d — радіус дії потенціалу домішкового атому, \vec{R} — положення атома домішки. Цей потенціал не локалізує електрони. Автор цієї монографії не розглядає домішкові стани електронів у квантовій точці. Нові методи (епітаксійне вирощування, метод літографії) та інші методи синтезу квантових точок розглянуто в монографії [4] і статтях Петрова № 4, 5 (4. РМ Petroff “Epitaxial Growth and Electronic Structure of Self-assembled Quantum Dots” 5. П. М. Петров «Самоорганізовані пристрої з квантовими точками») у збірнику статей [5]. У цих роботах відзначені властивості квантових точок, важливі для практичних застосувань: конфайнмент носіїв та їх пар, що локалізує частинки; особливості густини станів електронів, що наближають квантову точку до ізолюваного атома; багаточастинкові ефекти. Зазначається, що напівпровідникові квантові точки на основі InAs, GaAs, InAs-GaAs можуть бути використані в пристроях і гаджетах: детекторах, батареях, лазерах, транзисторах, квантових комп'ютерах, генераторах індивідуальних фотонів.

Теорія квантового транспорту електронів у системах з квантовими точками з урахуванням електрон-електронної взаємодії розглянута в оглядовій статті [6]. Автори цієї статті досліджували низькотемпературний електричний транспорт через квантову точку, яка пов'язана з двома провідними контактами. Роль електрон-електронної взаємодії в цьому явищі є визначальною. Провідність системи розраховується в широкому діапазоні температур. З'ясовано вплив кулонівської блокади та кондо-розсіювання електронів на температурну залежність провідності. Вплив електрон-електронної взаємодії на слабку локалізацію та осциляції Ааронова-Бома в квантових точках розглянуто в роботі [7].

В дипломній роботі бакалавра [8] були розраховані термодинамічні величини ідеального електронного газу у параболічній квантовій точці.

В даній дипломній роботі планується розрахувати великий термодинамічний потенціал квантової точки з урахуванням впливу локального домішкового рівня застосовуючи метод контурного інтегрування. Локальний рівень обумовлений наявністю домішкового атома у центрі квантової точки. Вважається що в якості потенціала домішкового атома можна використовувати потенціал спеціального виду – гауссів сепарабельний потенціал. Як буде продемонстровано у подальшій роботі, цей потенціал дає можливість точно розв'язати задачу розсіювання. Також у подальшій дипломній роботі планується проаналізувати осциляції термодинамічних величин електронного газу у квантовій точці з локальними станами електронів та надати відповідь стосовно фізичної інформації, яку можна отримати з цього ефекту.

Об'єкт дослідження — двовимірний електронний газ з домішковим атомом в магнітному полі обмежений потенціалом конфайнменту.

Предмет дослідження — термодинамічні властивості квантової точки з домішковим атомом в магнітному полі.

Мета роботи — розглянути вплив домішкового атома на термодинамічні властивості квантової точки в магнітному полі.

Практична цінність — полягає в широкому спектру застосування квантових точок с науці та техніці. Розвиток цього напрямку фізики буде сприяти появі нових технологій, або нових методів дослідження, теоретичних моделей.

Достовірність — достовірність підтверджується тим, що в роботі використовуються відомі методи статистичної та квантової фізики, в граничному випадку результати роботи переходять в відомі для двовимірного

електронного газу. Результати обґрунтовані використанням сучасної наукової літератури в галузі квантових точок.

РОЗДІЛ 1

АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Фізики та технологи цікавляться квантовими точками [1, 6, 7, 9, 10] з ряду причин, головна з яких полягає в тому, що вони є функціональними елементами сучасних пристроїв та електронних гаджетів. Цей інтерес посилюється після того, як дослідники навчилися синтезувати ці наносистеми в лабораторіях. Для теоретиків квантові точки представляють інтерес, оскільки вони є зручними об'єктами для тестування нових методів обчислення. Особливий інтерес представляють властивості квантових точок з домішковими атомами в магнітному полі. Через малу кількість електронів у квантовій точці навіть один атом домішки сильно впливає на її властивості. В межах обмеженого об'єму квантової точки в магнітному полі стають присутніми такі цікаві явища, як гібридизація просторового та магнітного квантування руху електрона. Одним із таких явищ є розглянута тут локалізація електронів на окремих атомах домішки.

Домішки в об'ємних і наносистемах відіграють подвійну роль. З одного боку, вони визначають низькотемпературну поведінку кінетичних характеристик системи. З іншого боку, домішки впливають на енергетичний спектр системи, що призводить до появи локальних і резонансних рівнів в енергетичному спектрі квазічастинок [11, 12, 13]. Ці рівні справляють глибокий вплив на властивості твердих тіл [14 – 22, 23 – 29].

Розроблені методи дослідження домішкових станів базуються на рівнянні Шредінгера та квантових функціях Гріна [15 – 22, 30 – 33]. Тим часом функціональні методи, отримані в квантовій теорії поля, широко розповсюджені в теорії твердого тіла [34, 35]. У поєднанні з технікою Келдиша [36, 37] вони стають потужним інструментом дослідження фізики конденсованих систем [35, 38, 39]. В дипломній роботі продемонструємо, як методи функціонального диференціювання та інтегрування з використанням змінних Грассмана можуть бути використані для розрахунку характеристик

домішкових станів електронів у наноструктурах. Формалізм, викладений у розділі 3, використовується в розділі 4 дипломної роботи для розрахунку характеристик домішкових станів електронів у квантових точках.

Функціональний підхід до формалізму Келдиша нещодавно був предметом вичерпної монографії [35], включаючи застосування до неупорядкованих провідників. Наскільки відомо, можливості функціональних методів у теорії домішкових станів електронів у наносистемах ще не вивчені повністю.

Загальна теорія домішкових станів електронів у двовимірних електронних системах була розроблена в серії робіт Азбеля, Гредескула, Авішаї та інших (див. огляд [13]) з використанням іншого методу розрахунку.

Для досягнення мети дослідження необхідно виконати такі завдання:

1. Розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера у квантовій точці з урахуванням домішкового атома в центрі та отримати енергетичний спектр електрона у квантовій точці з домішкою. У процесі розв'язання перейти до рівняння Ліппмана-Швінгера, а потенціал домішкового атома описувати в моделі гауссівського сепарабельного потенціала.
2. Отримати рівняння І. М. Ліфшиця для домішкових станів електронного газу в квантовій точці.
3. Застосувати гаусову сепарабельну апроксимацію, яка точно розв'язується у випадку домішкового потенціалу в квантовій точці.
4. Отримати наближене рівняння для спектра локальних рівнів електронів у квантовій точці та його аналітичне розв'язання.
5. Розрахувати густину станів електронів з урахуванням впливу локального рівня.

6. Розрахувати великий термодинамічний потенціал квантової точки з урахуванням впливу локального рівня застосовуючи метод контурного інтегрування Ю.Б. Румера.
7. Проаналізувати осциляції термодинамічних величин електронного газу у квантовій точці з локальними станами електронів та надати відповідь стосовно фізичної інформації, яку можна отримати з цього ефекту.
8. Підвести підсумки роботи та написати розділ Висновки.

РОЗДІЛ 2

МЕТОД ДОСЛІДЖЕННЯ ТА МОДЕЛЬ

В даному розділу розглядаються фізична модель, та математичні методи застосовані при дослідженні квантової точки з домішкою.

2.1. Модель квантової точки

У якості моделі квантової точки було обрано двовимірний електронний газ (2DEG), який обмежений в площині зовнішнім потенціалом конфайнменту ω_0 . Зовнішнє магнітне поле \vec{B} з векторним потенціалом A має напрям перпендикулярний до площини електронного газу.

Гамільтоніан електрона в квантовій точці без урахування домішки має вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_*} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}), \quad (2.1)$$

де $U(r)$ – потенціал конфайнменту. Так як використовується модель параболічного потенціалу, то він має вигляд:

$$U(r) = \frac{m_* \omega_0^2 r^2}{2}. \quad (2.2)$$

2.2. Модель домішкового потенціалу

Для дослідження впливу домішки вважається, що домішковий атом розташований у центрі квантової точки. У роботі домішковий потенціал буде апроксимовано гаусовим сепарабельним потенціалом.

Оператор потенціальної енергії взаємодії електрона з домішкою записується у вигляді проекційного оператора:

$$\hat{V} = |\eta\rangle u_0 \langle \eta|. \quad (2.3)$$

У координатному представленні:

$$\eta(r) = \langle r | \eta \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}a} \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right). \quad (2.4)$$

Такий вигляд потенціалу дозволяє уникнути розбіжностей, характерних для дельтафункціональних моделей, та точно розв'язати задачу розсіювання.

2.3. Метод функції Гріна та рівняння Ліфшиця

Для знаходження енергетичного спектра системи з гамільтоніаном $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, використовується метод функції Гріна. Повна функція Гріна \hat{G} пов'язана з функцією Гріна незбуреної \hat{G}_0 системи рівнянням[16,17,32]:

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{T} \hat{G}_0, \quad (2.5)$$

де \hat{T} – оператор розсіювання[48,49].

Для сепарабельного потенціалу \hat{T} має вигляд:

$$\hat{T} = \frac{u_0 |\eta\rangle \langle \eta|}{1 - u_0 \langle \eta | \hat{G}_0 | \eta \rangle}. \quad (2.6)$$

Полюси T матриці визначають спектр зв'язаних станів системи. Умова існування полюса призводить до рівняння Ліфшиця для визначення енергії локальних рівнів[11.12]:

$$1 - u_0 \sum_k \frac{|\langle \eta | k \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma} + i0} = 0. \quad (2.7)$$

Отримане рівняння є трансцендентним рівнянням, розв'язки якого дають положення локальних рівнів енергії, що виникають в результаті взаємодії електронів з домішковим атомом у квантовій точці.

РОЗДІЛ 3

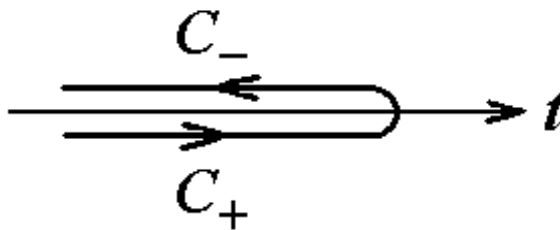
Функціональний підхід у теорії домішкових станів електронів у наносистемах

. У цьому підрозділі ми опишемо, як формалізм робіт [35, 40] може бути застосований до вивчення домішкових станів електронів на ізольованих домішкових атомах у довільному магнітному полі. Ця теорія застосовна до масивних провідників і двовимірного електронного газу та квантових точок. Переваги функціональних методів порівняно зі стандартними методами полягають у тому, що перехід від операторів до класичних об'єктів дозволяє спростити, прискорити та зробити обчислення більш наочними. Універсальна мова функціонального підходу дозволяє описати багато явищ у рівноважних і нерівноважних системах унікальним методом. Зокрема, формалізм Келдиша дозволяє досліджувати вплив домішкових станів електронів на властивості нерівноважних систем.

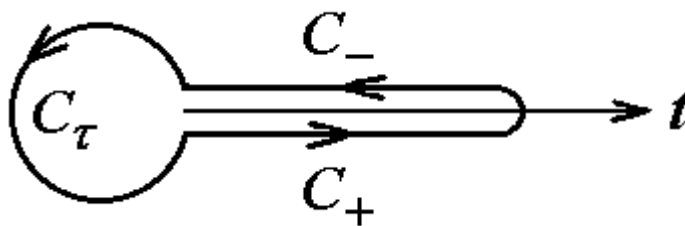
Запишемо гамільтоніан електронів як $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$, де \hat{H}_0 враховує магнітне поле, а \hat{V} враховує взаємодію з випадковим зовнішнім полем обумовленим домішковими атомами. Як і в роботах [35, 40], ми вважаємо, що воно «вмикається» в початковий момент часу $t_0 = -\infty$, коли система електронів ще перебувала в стані рівноваги. Тоді матричну функцію Гріна електронів [35, 40] можна записати у вигляді

$$i\hbar G_{12} = \langle T_C (\widehat{\psi}_1^H \widehat{\psi}_2^{+H}) \rangle, \quad (3.1)$$

де індекси 1 і 2 відповідають змінним \vec{r}, α, t (\vec{r} радіус-вектор, $\alpha = \pm 1$ спінова змінна, t – час), $\widehat{\psi}_1^H$ і $\widehat{\psi}_2^{+H}$ польові оператори знищення та породження електронів в представленні Гейзенберга, T_C – символ хронологічного впорядкування операторів по часовому контуру Келдиша-Швінгера $C_t = C_+ - C_-$ (рис . 3.1 (а)), кутові дужки позначають гіббсівське



а)



б)

Рисунок 3.1. Часовий контур Келдиша-Швінгера (а) і розширений контур (б).

усереднення з гамільтоніаном \hat{H}_0 . Стала Планка вважається рівною одиниці. У виразі (3.1) матричні індекси \pm у двовимірному просторі Келдиша опущені. У матричній формі функція Гріна (3.1) має вигляд

$$G_{12} = \begin{pmatrix} G_{12}^{++} & G_{12}^{+-} \\ G_{12}^{-+} & G_{12}^{--} \end{pmatrix} . \quad (3.2)$$

Тут запис у формі G_{12}^{+-} , наприклад, вказує на те, що $t_1 \in C_+$ і $t_2 \in C_-$. Польові оператори $\hat{\psi}_1^H$, $\hat{\psi}_2^{+H}$ в виразі (3.1) зручно переписати в представленні Шредінгера. В результаті отримуємо

$$iG_{12} = \langle T_C (\widehat{\psi}_1^S \widehat{\psi}_2^{+S} \widehat{U}) \rangle \quad (3.3)$$

де

$$\hat{U}(t, t_0) = T_C \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \right]$$

– оператор еволюції по контуру C_t .

Використовуючи стандартну процедуру [34, 36], представимо функцію Гріна (3.3) в вигляді інтегралу по траєкторіях вздовж полів Грассмана ψ_1, ψ_2 , пов'язаних з операторами поля. Для цього ми вводимо показник Гіббса $\exp(-\beta \hat{H}_0)$ (β – зворотня температура) під оператор хронологічного добутку. Це досягається використанням розширеного контуру $C = C_\tau + C_+ + C_-$ (рис. 3.1 (b)) і оператора впорядкування у часі T_C вздовж цього контуру. Вважається, що на ділянці контуру C_τ гамільтоніан електронів дорівнює \hat{H}_0 . Таким чином функція Гріна (3.3) виглядає наступним чином:

$$iG_{12} = \int D\psi^* \int D\psi \psi_1 \psi_2^* \exp \left\{ i \oint dt \left[\sum_a \int d\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}, t) i \frac{\partial}{\partial t} \psi_a(\vec{r}, t) - H(\psi^*, \psi) \right] \right\} \times \left(\int D\psi^* \int D\psi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \oint dt \left[\sum_a \int d\vec{r} \psi_a^*(\vec{r}, t) i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a(\vec{r}, t) - H(\psi^*, \psi) \right] \right\} \right)^{-1} \quad (3.4)$$

Функція $H(\psi^*, \psi)$ отримується з оператора $\hat{H}(\hat{\psi}^+, \hat{\psi})$ шляхом заміни польових операторів на змінні Грассмана.

Функції Гріна можуть бути отримані функціональним диференціюванням породжуючого функціоналу [34]

$$Z[J, J^*] = \int D\psi^* \int D\psi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_C dt \sum_a \left[dr \psi_a^*(r, t) i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_a(r, t) - H(\psi^*, \psi) + \sum_a \int dr \psi_a^*(r, t) J_a(r, t) + \sum_a \int dr J_a^*(r, t) \psi_a(r, t) \right] \right\} \quad (3.5)$$

з джерелами J^*, J фермієвських полів. Зокрема, функція (3.1) дорівнює

$$iG_{12} = \left(\frac{\delta^L}{i \delta J_1^*} \frac{\delta^R}{i \delta J_2} W[J, J^*] \right)_{J, J^* = 0}, \quad (3.6)$$

де $W = \ln Z$ – породжуючий функціонал для зв'язаних функцій Гріна, індекс L та R позначає ліві та праві функціональні похідні за змінними Грассмана J^*, J .

Перетворимо рівняння (3.5) у (κ, α, t) -зображення (κ – набір орбітальних квантових чисел електрона у магнітному полі) і обчислимо вільний породжуючий функціонал у магнітному полі та полі джерел:

$$Z_0[J, J^*] = \int Da^* \int Da \exp \left\{ i \oint dt \sum_{\kappa\alpha} \left[a_{\kappa\alpha}^*(t) \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_{\kappa\alpha} \right) a_{\kappa\alpha}(t) + J_{\kappa\alpha}^*(t) a_{\kappa\alpha}(t) + a_{\kappa\alpha}^*(t) J_{\kappa\alpha}(t) \right] \right\} \quad (3.7)$$

Тут $a_{\kappa\alpha}$, $a_{\kappa\alpha}^*$, $J_{\kappa\alpha}$, $J_{\kappa\alpha}^*$ – коефіцієнти розкладання змінних Грассмана ψ, ψ^*, J, J^* у базисі Ландау, $\varepsilon_{\kappa\alpha}$ – енергія електрона у магнітному полі, розрахована від рівня хімічного потенціалу. Функції $a(t)$ та $a^*(t)$ задовольняють граничним умовам:

$$\begin{aligned} a_+(\infty) &= a_-(\infty), & a_+(\infty) &= a_-(\infty), \\ a_-(-\infty) &= a_\tau(0), & a_-^*(-\infty) &= a_\tau^*(0), \\ a_+(-\infty) &= -a_\tau(\beta), & a_+^*(-\infty) &= -a_\tau^*(\beta). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Індекси $+$, $-$, τ пов'язані з частинами C_+ , C_- , C_τ розширеного контуру C .

У рівнянні (3.7) розкладемо коефіцієнти $a = a_0 + a'$, $a^* = a_0^* + a'^*$, де a_0 і a_0^* є такими, що лінійні члени по змінним Грассмана a', a'^* в показнику експоненти випадають. Тому необхідно, щоб функції a_0^+ , a_0^- , a_0^τ задовольняли системі рівнянь

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon \right) a_0^+ = -J^+ \quad , \quad \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon \right) a_0^- = J^- \quad , \quad \left(\frac{\partial}{\partial \tau} + \varepsilon \right) a_0^\tau = 0 \quad (3.9)$$

та умовам (3.8). Якщо помістити $J = J^+$ на частині контуру C_+ а $J = -J^-$ на частині контуру C_- , тоді змінні t і τ будуть зв'язані як $\tau = it$.

Розв'язок системи рівнянь (3.9) можна записати у вигляді

$$a_{\kappa\alpha}^0(t) = - \int_{-\infty}^{\infty} dt' G_{\kappa\alpha}^0(t-t') J_{\kappa\alpha}(t'),$$

де $G_{\kappa\alpha}^0(t)$ – матрична функція Гріна електронів у магнітному полі. Її компоненти дорівнюють

$$G_{\kappa\alpha}^{0++}(t) = i [\Theta(t)(f_{\kappa\alpha} - 1) + \Theta(-t)f_{\kappa\alpha}] \exp(-i\varepsilon_{\kappa\alpha}t),$$

$$G_{\kappa\alpha}^{0+-}(t) = i f_{\kappa\alpha} \exp(-i\varepsilon_{\kappa\alpha}t),$$

$$G_{\kappa\alpha}^{0-+}(t) = i(f_{\kappa\alpha} - 1) \exp(-i\varepsilon_{\kappa\alpha}t),$$

$$G_{\kappa\alpha}^{0--}(t) = i [\Theta(t)f_{\kappa\alpha} + \Theta(-t)(f_{\kappa\alpha} - 1)] \exp(-i\varepsilon_{\kappa\alpha}t),$$

де $\Theta(t)$ і $f_{\kappa\alpha}$ – функції Хевісайда та Фермі відповідно.

Інтеграл по траєкторіях (3.7) за змінними Грассмана a^* , a є інтегралом Гаусса. Його можна розрахувати за правилом [34, 35]

$$\int Da^* \int Da' \exp(-a^* A a') = \det A,$$

де A – неособлива матриця, нерелевантна для нашого виведення. Важливим фактором породжуючого функціоналу (3.7) є рівність

$$Z_0[J, J^*] = \exp\left(-i \sum_{12} J_1^* G_{12}^0 J_2\right) \quad (3.10)$$

Тут $1 = (\kappa_1, \alpha_1, t_1)$, $\sum_1 = \sum_{\kappa_1 \alpha_1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1$. Символ підсумовування за індексами Келдиша \pm в рівнянні (3.10) опущено.

Гамільтоніан \hat{V} описує взаємодію електронів з атомами домішок, випадково розподіленими у зразку:

$$\hat{V} = \sum_{\kappa_1 \kappa_2 \alpha} \langle \kappa_1 | u | \kappa_2 \rangle \hat{a}_{\kappa_1 \alpha}^+ \hat{a}_{\kappa_2 \alpha}$$

де $\hat{a}_{\kappa\alpha}$ і $\hat{a}_{\kappa\alpha}^+$ – оператори знищення та породження електронів у стані $|\kappa\alpha\rangle$, u – енергія електрона в полі домішкових атомів. Оскільки $V = 0$ на частині контуру C_T , то інтеграл у показнику степеня (3.5) дорівнює

$$\oint_C dt V(a^*, a) = \sum_{12} U_{12} a_1^* \sigma_3 a_2 \quad (3.11)$$

де $U_{12} = \langle \kappa_1 | u | \kappa_2 \rangle \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta(t_1 - t_2)$, σ_3 – третя матриця Паулі.

З рівняння (3.5) зрозуміло, що повний твірний функціонал може бути отриманий з вільного функціоналу (3.10) в результаті дії оператора:

$$\exp\left(-i \oint_C dt V\right),$$

отриманої з рівняння (3.11) в результаті заміни

$$a_{\kappa\alpha}^*(t) \rightarrow \frac{\delta^R}{i\delta J_{\kappa\alpha}(t)}, \quad a_{\kappa\alpha}(t) \rightarrow \frac{\delta^L}{i\delta J_{\kappa\alpha}^*(t)}.$$

Отже, твірний функціонал (3.5) дорівнює

$$Z[J, J^*] = \exp\left(-i \sum_{12} U_{12} \frac{\delta^R}{i\delta J_1} \sigma_3 \frac{\delta^L}{i\delta J_2^*}\right) \exp\left(-i \sum_{34} J_3^* G_{34}^0 J_4\right) \quad (3.12)$$

У показнику експоненти необхідно виконувати підсумовування за індексами Келдиша. Таким чином, процедуру розрахунку функції Гріна системи можна здійснити шляхом обчислення функціональної похідної в рівняннях (3.6) і (3.12). Цю процедуру здійснити простіше порівняно з методом локальних збурень з використанням операторного формалізму.

Рівняння (3.12) дозволяє записати твірний функціонал у вигляді ряду по степенях збурення V . Функція Гріна (3.6) також представлена у вигляді ряду,

який збігається з рядом, отриманим за допомогою діаграмної техніки та теореми Віка [34]. Поправка першого порядку до твірного функціоналу W дорівнює

$$\begin{aligned}
W_1[J, J^*] = & \sum_{12} U_{12} \begin{pmatrix} 0^{++} & 0^{--} \\ G_{21} & -G_{21} \end{pmatrix} - i \sum_{12} U_{12} \sum_{34} \left[J_3^+ J_4^+ \begin{pmatrix} 0^{+-} & 0^{-+} & 0^{++} & 0^{++} \\ G_{31} & G_{24} & -G_{31} & G_{24} \end{pmatrix} + \right. \\
& + J_3^+ J_4^- \begin{pmatrix} 0^{+-} & 0^{--} & 0^{++} & 0^{+-} \\ G_{31} & G_{24} & -G_{31} & G_{24} \end{pmatrix} + J_3^- J_4^+ \begin{pmatrix} 0^{--} & 0^{-+} & 0^{--} & 0^{++} \\ G_{31} & G_{24} & -G_{31} & G_{24} \end{pmatrix} + \\
& \left. + J_3^- J_4^- \begin{pmatrix} 0^{--} & 0^{--} & 0^{--} & 0^{+-} \\ G_{31} & G_{24} & -G_{31} & G_{24} \end{pmatrix} \right].
\end{aligned}$$

Використовуючи рівняння (3.6), отримуємо поправки першого порядку до компонентів матричної функції Гріна (3.2):

$$\begin{aligned}
G_{12}^{1++} &= \sum_{34} U_{34} \left(G_{13}^{0+-} G_{42}^{0-+} - G_{13}^{0++} G_{42}^{0++} \right), \\
G_{12}^{1+-} &= \sum_{34} U_{34} \left(G_{13}^{0+-} G_{42}^{0--} - G_{13}^{0++} G_{42}^{0+-} \right), \\
G_{12}^{1-+} &= \sum_{34} U_{34} \left(G_{13}^{0--} G_{42}^{0-+} - G_{13}^{0-+} G_{42}^{0++} \right), \\
G_{12}^{1--} &= \sum_{34} U_{34} \left(G_{13}^{0--} G_{42}^{0--} - G_{13}^{0-+} G_{42}^{0+-} \right).
\end{aligned}$$

Діаграми для цих поправок представлені в [41]. Від звичайних схем хрестової техніки [42] вони відрізняються наявністю додаткових індексів \pm на кінцях ліній.

Тут ми обмежуємося вибірковою підсумовуванням діаграм з одним хрестом для запізнюючої функції Гріна $G = G^{++} - G^{+-}$ електронів у наноструктурі, усередненої по домішкових конфігураціях. Таке наближення дозволяє точно врахувати амплітуду розсіювання електронів ізольованими домішковими атомами при малій концентрації таких атомів. Виберемо потенціал розсіювання у вигляді

$$\hat{V} = \sum_j |\eta_j\rangle u_0 \langle \eta_j| \quad (3.13)$$

де $|\eta_j\rangle\langle\eta_j|$ – оператор проектування на вектор $|\eta_j\rangle$, u_0 – константа, індекс j нумерує атоми домішок. Вважаємо, що функція $\eta(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\eta\rangle$ дорівнює

$$\eta(r) = (\sqrt{\pi}a)^{-1} \exp\left(-\frac{r^2}{2a^2}\right),$$

де a постійна. Перетворення виразу (3.13) в суму дельта-функцій $\nu_0\delta(\vec{r} - \vec{r}_j)$ виконується шляхом заміни

$$4\pi \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ u_0 \rightarrow \infty}} (a^2 u_0) = \nu_0.$$

У випадку потенціалу (3.13) сума діаграм з одним хрестом для середньої функції Гріна в $(\kappa, \alpha, \varepsilon)$ представлення дорівнює $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{T} \hat{G}_0$, де функція

$$T_\alpha(\varepsilon) = u_0 n_i \left(1 - u_0 \sum_{\kappa} \frac{|\langle\kappa|\eta\rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\kappa\alpha} + i0} \right)^{-1} \quad (3.14)$$

пропорційна амплітуді розсіювання електронів, n_i – густина домішкових атомів.

РОЗДІЛ 4

Домішкові стани електронів у квантових точках у зовнішньому магнітному полі

У цьому розділі ми представляємо результати теоретичного дослідження локальних станів електронів у квантових точках у квантуючому магнітному полі з використанням методу вироджених регулярних збурень [43].

4.1. Енергетичний спектр і густина станів бездомішкових квантових точок

Хвильова функція стаціонарного стану електрона в полі утримання та в магнітному полі дорівнює [1 – 3, 9, 10, 8]:

$$\psi_{nm}(\rho, \varphi) = \frac{1}{l} \sqrt{\frac{n!}{(n+|m|)!}} \left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right)^{|m|/2} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l^2}\right) L_n^{|m|}\left(\frac{\rho^2}{2l^2}\right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (4.1)$$

де n і m – радіальне та азимутальне квантові числа, φ – полярний кут, $l = (m_*\omega)^{-1/2}$ – магнітна довжина, $\omega = (\omega_c^2 + 4\omega_0^2)^{1/2}$ – гібридна частота електронів (ω_c – циклотронна частота), $L_n^{|m|}$ – узагальнені поліноми Лагерра. Квантова стала тут і далі приймається рівною одиниці. Енергія електрона в стані (4.1) дорівнює [8]:

$$\varepsilon_{nm\sigma} = \omega \left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left(|m| - \frac{\omega_c}{\omega} m \right) \right] + \sigma \mu B, \quad (4.2)$$

де $\sigma = \pm 1$ – спінове квантове число, μ – спіновий магнітний момент електрона. Спектр (4.2) має серіальний характер [1, 9]. Густина станів можна обчислити за формулою

$$\nu(\varepsilon) = \sum_{nm\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nm\sigma})$$

4.2. Амплітуда розсіювання електронів у квантовій точці

Припустимо, що домішковий атом знаходиться в центрі параболічної квантової точки. Потенціал домішки апроксимуємо сепарабельним оператором

$$u = |\eta\rangle u_0 \langle \eta|, \quad (4.3)$$

де u_0 – константа, а $|\eta\rangle$ – деякий нормований стан. Вважатимемо, що функція $\langle \vec{\rho} | \eta \rangle$ має гаусів вигляд:

$$\langle \vec{\rho} | \eta \rangle = (\sqrt{\pi}a)^{-1} \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a^2}\right), \quad (4.4)$$

де a протяжність цієї функції. На рисунку 4.1 схематично показаний потенціал V

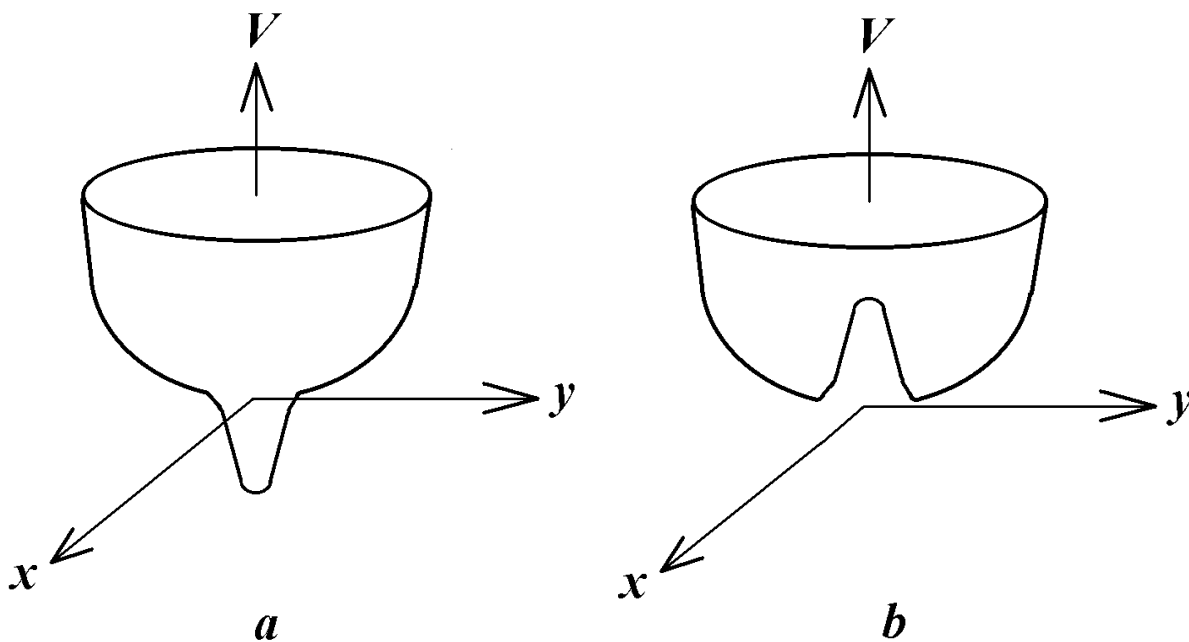


Рисунок 4.1. Потенціал конфайнменту та потенціал притягання (a) та відштовхування (b) електрона в квантовій точці домішкового атома.

конфайнменту та домішковий потенціал притягання (a) та відштовхування (b) електрона в квантовій точці за наявності домішкового атому. Потенціал (4.3) – (4.4) використовувався в літературі [11], функція (4.4) використовувалася при дослідженні домішкових електронних станів в об'ємних провідниках у літературі [44, 45, 46] . Граничний перехід до δ -потенціалу $v_0\delta(\vec{\rho})$ здійснюється підстановкою

$$4\pi \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ u_0 \rightarrow \infty}} (a^2 u_0) = v_0 \quad . \quad (4.5)$$

Переваги вибраного потенціалу (4.3), (4.4) такі, що він дозволяє точно розв'язати проблему домішкових станів електронів у квантових точках і допомагає уникнути розбіжностей сум та інтегралів, які існують у випадку дельта-функціонального потенціалу. Крім того, в даній теорії існують два незалежних параметра u_0/ω і a/l , а не один, v_0 як у випадку методу потенціалу нульового радіуса [47].

Функція Гріна G електрона в квантовій точці пов'язана з оператором розсіяння T через співвідношення [48, 49] $\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{T} \hat{G}_0$, де G_0 – функція Гріна за відсутності потенціалу домішки. Оператор T дорівнює [48] $|\eta\rangle T_\sigma(\varepsilon) \langle \eta|$, де функція

$$T_\sigma(\varepsilon) = u_0 \left(1 - u_0 \sum_{\kappa} \frac{|\langle \eta | \kappa \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\kappa\sigma} + i0} \right)^{-1} = u_0 \{ 1 - u_0 [F_\sigma(\varepsilon) - i\pi g_\sigma(\varepsilon)] \}^{-1} \quad (4.6)$$

пропорційна амплітуді розсіяння електрона з енергією ε на домішковому атомі. Тут $\kappa = (n, m)$, $\varepsilon_{\kappa\sigma}$ – енергетичні рівні електронів (4.2). Перекриття станів $\langle \eta | \kappa \rangle$, яке входять до рівняння (4.6), може бути розраховано та має вигляд

$$\langle \eta | nm \rangle = \delta_{m0} \sqrt{2} \frac{l}{a} \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{1}{2} \right)^{-1} \left[\left(\frac{l^2}{a^2} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{1}{2} \right)^{-1} \right]^n \quad . \quad (4.7)$$

Функція $g_{\sigma}(\varepsilon)$ має такий вигляд:

$$g_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{8}{\omega} \left(\frac{l}{a}\right)^2 \left[2\left(\frac{l}{a}\right)^2 + 1\right]^{-2} \left[\left(2\frac{l^2}{a^2} + 1\right)\left(2\frac{l^2}{a^2} - 1\right)\right]^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \delta[n + \nu_{\sigma}(\varepsilon)] \quad ,$$

(4.8)

де

$$\nu_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{2} + \frac{\sigma\mu B - \varepsilon}{\omega} \quad .$$

(4.9)

У граничному випадку $u_0 \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$ множник $u_0 g_0(\varepsilon)$ дорівнює $\nu_0 \nu_{\sigma}(\varepsilon)$, де $\nu_{\sigma}(\varepsilon)$ – густина електронних станів у магнітному полі. Функція $F_{\sigma}(\varepsilon)$ пов'язана з функцією (4.8) співвідношенням:

$$F_{\sigma}(\varepsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{g_{\sigma}(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon'} \quad .$$

Символ Кронекера δ_{m0} в рівнянні (4.7) свідчить про те, що домішковий потенціал (4.3), (4.4) розсіює електрони лише з нульовою проекцією кутового моменту на напрямок магнітного поля.

Полюси амплітуди розсіювання (4.6) в комплексній енергетичній площині пов'язані з локальним і резонансним рівнями енергії електрона в полі домішкового атома. Вони є коренями рівняння Ліфшиця:

$$1 - u_0 F_{\sigma}(\varepsilon) = 0 \quad .$$

(4.10)

У розглянутому випадку це рівняння має такий вигляд:

$$\frac{\omega}{u_0} = (z - 1) \Phi(z, 1, \nu_{\sigma}) \quad ,$$

(4.11)

де

$$z = \left(\frac{2\xi - 1}{2\xi + 1}\right)^2, \quad \xi = \left(\frac{l}{a}\right)^2,$$

$$\Phi(z, 1, \nu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n + \nu} \quad (4.12)$$

($z < 1, \nu \neq 0, -1, -2, \dots$) . Функція Φ пов'язана з гіпергеометричною функцією Гауса F через співвідношення [50]

$$\Phi(z, 1, \nu) = \frac{1}{\nu} F(1, \nu; 1 + \nu; z) \quad (4.13)$$

Точне рівняння (4.11) для локальних рівнів ε_l містить два незалежні параметри: ω/u_0 і l/a . Аналіз цього рівняння показує, що в енергетичному спектрі електронів існує набір локальних рівнів ε_l , відщеплених від границь $\varepsilon_{n0\sigma}$ серій (4.2) у напрямку вниз у випадку притягуючого домішкового потенціалу ($u_0 < 0$) та у напрямку вгору у випадку потенціалу відштовхування ($u_0 > 0$). Розглянемо розв'язки рівняння (4.11) у кількох граничних випадках.

Якщо виконано $z \leq 1$, тобто значення a і l суттєво відрізняються, то можна скористатися відомим представленням гіпергеометричної функції Гауса [50]

$$F(a, b; a + b; z) = \frac{\Gamma(a + b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a + n)\Gamma(b + n)}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n!)^2} \times \\ \times [2\psi(n + 1) - \psi(a + n) - \psi(b + n) - \ln(1 - z)] (1 - z)^n \\ (|\arg(1 - z)| < \pi, |1 - z| < 1),$$

де ψ – логарифмічна похідна гамма-функції Γ . Використовуючи це представлення, з рівняння (4.11) і рівняння (4.13) при $z \leq 1$ отримуємо наближене рівняння для локальних рівнів:

$$\psi(v_\sigma) = \ln \left\{ e^{-\gamma} \exp \left[\frac{\omega}{u_0(1 - z)} \right] (1 - z)^{-1} \right\}, \quad (4.14)$$

де $\gamma = 0,577 \dots$ число Ейлера. Для отримання розв'язку цього рівняння при $a \ll l$ і $a \gg l$ скористаємося представленням функції ψ у вигляді [50]:

$$\psi(\nu) = -\gamma + (\nu - 1) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)(n+\nu)}.$$

4.3. Фізичні характеристики домішкових станів у квантовій точці

З рівняння (4.14) отримаємо вираз для відстані $\Delta_{n\sigma} = \varepsilon_{n0\sigma} - \varepsilon_{n\sigma}^l$ між межею зони Ландау $\varepsilon_{n0\sigma}$ (4.2) і локальним $\varepsilon_{n\sigma}^l$ рівнем :

$$\Delta = \begin{cases} -\omega \left\{ \ln \left[\frac{1}{2} \left(\frac{l}{a} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \left(\frac{l}{a} \right)^2 \frac{\omega}{u_0} \right\}^{-1}, & l \gg a, \\ -\omega \left\{ \ln \left[\frac{1}{8} \left(\frac{a}{l} \right)^2 \right] + \frac{1}{8} \left(\frac{a}{l} \right)^2 \frac{\omega}{u_0} \right\}^{-1}, & l \ll a. \end{cases} \quad (4.15)$$

Звідси випливає, що відщеплені домішками локальні рівні існують і за відсутності магнітного поля. Таким чином, стимулюючий стосовно локалізації електронів вплив здійснює потенціал конфайнменту. У слабкому магнітному полі величина Δ зростає зі збільшенням величини B пропорційно ω , а в сильному зменшується за законом $\Delta \propto \omega^{-1}$. Коли потенціал конфайнменту відсутній ($\omega_0 = 0, \omega = \omega_c$), формули (4.15) описують положення локальних рівнів у 2D електронному газі в магнітному полі [51]. З формули (4.15) випливає, що при $u_0 > 0$ локальний рівень відщеплений від нижньої межі спектру $\varepsilon_{00(-1)}$ розташовується в області $\varepsilon < 0$, якщо $\mu B > \omega/2$ і $u_0 < F_{-1}^{-1}(0)$. Важливо звернути увагу на те, що перша формула (4.15) для 2D електронного газу в слабкому магнітному полі відрізняється лише числовими множниками від формули, яка отримана в статті [46] з використанням іншої моделі потенціалу домішки. Формули (4.15) легко вивести з рівняння (4.11), якщо ми виділимо у функції Φ доданок $-\ln(1-z)$ [50], залишивши лише внесок із мінімальним знаменником у решті суми при $|\Delta| \propto \omega$. В результаті отримуємо

$$\Delta_n = -\omega z^n \left[\ln(1-z)^{-1} + \frac{\omega}{u_0(1-z)} \right]. \quad (4.16)$$

Якщо верхній індекс n локального рівня зростає, він наближається до межі серії $\varepsilon_{n0\sigma}$. У квантовій границі з рівняння (4.11) отримуємо:

$$\Delta = -2u_0 \left(\frac{l}{a} \right)^2 \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{l}{a} \right)^2 \right]^{-2}.$$

Якщо $|u_0| \rightarrow \infty$, з виразу (4.11) можна отримати енергію локального рівня $\varepsilon_l = -|u_0|$.

У випадку слабкого квантування рівнів $\omega \gg |\varepsilon|$ суму в (4.11) можна замінити інтегралом. Тоді вираз (4.11) набуває вигляду:

$$\frac{\omega}{u_0(1-z)} = \exp(\nu |\ln z|) \text{Ei}(-\nu |\ln z|), \quad (4.17)$$

де $Ei(x)$ – інтегральна експоненціальна функція [50]. При $|\nu \ln z| \ll 1$ тут можна обмежитися основними внесками розкладання функції $Ei(x)$ стосовно степеням x . Тоді вираз (4.17) набуває вигляду:

$$\frac{\omega}{u_0(1-z)} = \ln(|\nu \ln z|).$$

В результаті отримуємо

$$|\nu| = |\ln z|^{-1} \exp \left[\frac{\omega}{u_0(1-z)} \right].$$

Якщо виконано $u_0 < 0$ і $\omega_0 = \omega_c = 0$, то з цієї формули ми отримуємо положення локального рівня в 2D електронному газі

$$\varepsilon_l = -\frac{1}{2m_* a^2} \exp \left(-\frac{1}{2m_* a^2 |u_0|} \right).$$

У граничному випадку δ -потенціалу (4.5) показник степеня у експоненті співпадає з отриманим у роботі [53].

З рівняння (4.11) випливає, що на діаграмі залежності ε_l від магнітного поля є різкий провал при $\xi = 1/2$

$$B_0 = \frac{2m_*c}{e} \left(\frac{1}{m_*^2 a^4} - \omega_0^2 \right)^{1/2}. \quad (4.18)$$

Тут e значення заряду електрона, c – швидкість світла. Щоб знайти положення локального рівня при $\xi = 1/2$, скористаємося асимптотикою інтегральної показникової функції

$$\text{Ei}(-x) \sim -\frac{e^{-x}}{x} \quad (4.19)$$

коли $|\nu \ln z| \ll 1$. Тоді з формули (4.17) знаходимо при $u_0 < 0$ вираз

$$\Delta = |u_0| \left| \ln \left(\frac{1}{2} - \xi \right)^2 \right|^{-1}. \quad (4.20)$$

На рисунку 4.2 показано залежність відносної енергії відщеплення Δ/ω між рівнями

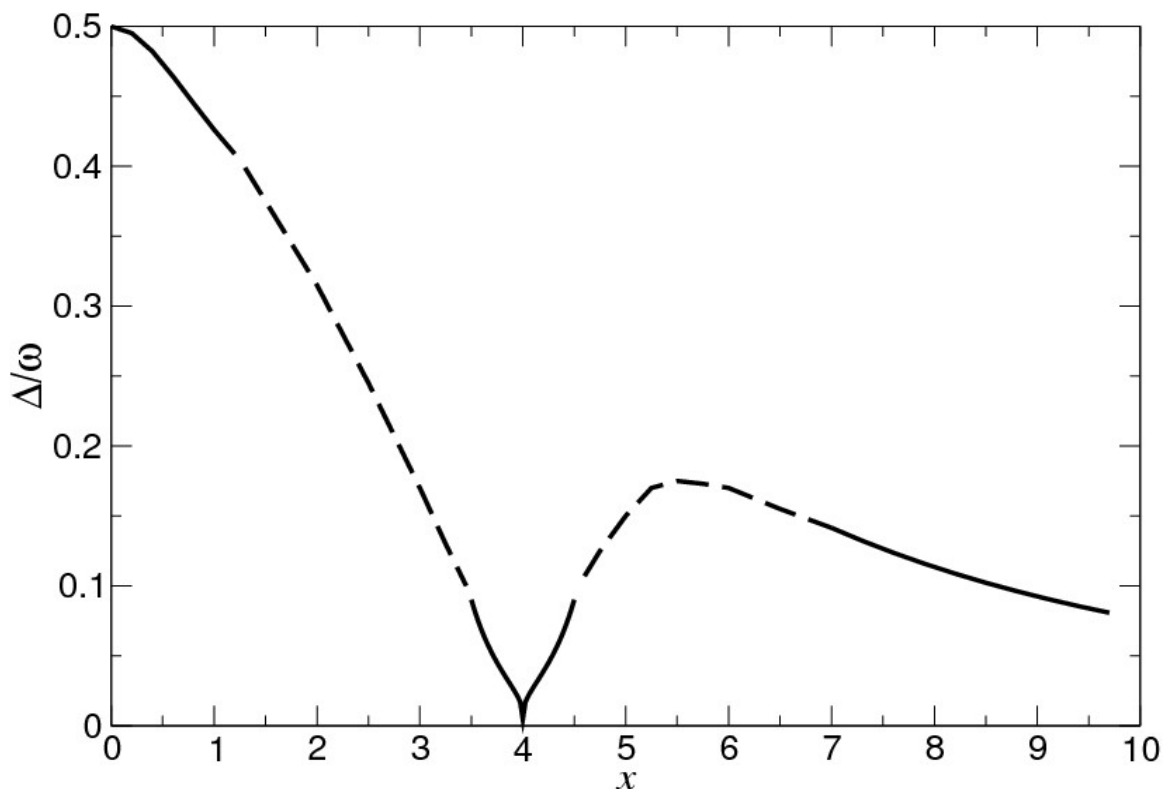


Рисунок 4.2. Залежність відстані між рівнями (4.2) і локальними рівнями від магнітного поля

$\varepsilon_{n0\sigma}$ (4.2) і локальними рівнями від магнітного поля при $|u_0|/\varepsilon_0 = 0.25$, $\omega_0/\varepsilon_0 = 0.25$. Тут $\varepsilon_0 = (m_* a^2)^{-1}$, $x = \omega_c/2\omega_0$, $x_0 = eB_0/2m_* c \omega_0$. Суцільна крива з'єднує точки, отримані з асимптот (4.15) і (4.19).

Нормована радіальна хвильова функція електрона у зв'язаному стані дорівнює

$$R_\sigma(\rho) = \frac{1}{l} \frac{|\Gamma(\nu_\sigma)|}{[\psi'(\nu_\sigma)]^{1/2}} \exp\left(-\frac{\rho^2}{4l^2}\right) \Psi\left(\nu_\sigma, 1; \frac{\rho^2}{2l^2}\right),$$

де ψ' – тригамма-функція, Ψ – вироджена гіпергеометрична функція [50]. Значення ν_σ в цій формулі береться в точці $\varepsilon = \varepsilon_l$.

У можливих застосуваннях доводиться мати справу з лишками амплітуди розсіювання (4.6) в полюсах. Вони дорівнюють:

$$r = \begin{cases} \frac{1}{2} \omega^2 \left(\frac{l}{a}\right)^2 \zeta^{-1}\left(2, -\frac{\Delta}{\omega}\right), & a \ll l \\ \frac{1}{8} \omega^2 \left(\frac{a}{l}\right)^2 \zeta^{-1}\left(2, -\frac{\Delta}{\omega}\right), & a \gg l \end{cases}$$

де ζ – узагальнена дзета-функція Рімана. Як і в об’ємних провідниках [24, 25], лишки визначають, зокрема, сили осциляторів резонансних переходів електронів між рівнями (4.2) і локальними рівнями.

У випадку квантової точки на основі гетеросистеми GaAs/Al_xGa_{1-x}As з 2D електронним газом можна застосувати чисельні значення $m_* = 10^{-28}g$, $a/l = 0,1$, $\omega_0 = \omega_c$, $|u_0|/\omega = 10$ у полі $B = 10^4G$. Тоді з виразу (4.15) отримуємо $|\Delta|/\omega = 0,1$.

РОЗДІЛ 5

Квантові осциляції термодинамічних величин електронного газу у квантовій точці з локальними станами електронів

Підвищений інтерес дослідників до двовимірного електронного газу у квантовій точці зумовлений низкою причин. Такі системи є складовою частиною багатьох мікроелектронних пристроїв. Двовимірний електронний газ у параболічній квантовій точці є зручним об'єктом для перевірки нових фізичних теорій. У цих системах виявлено низку фізичних явищ, які не мають аналогів у масивних провідниках.

Інтенсивно вивчаються квантові осциляції термодинамічних величин двовимірного електронного газу в магнітному полі [54, 55, 56]. Розглядаються як чисті провідники, так і двовимірні системи з домішковими атомами. Останні розширили рівні Ландау та призвели до фактора Дінгла в осцилюючих частинах термодинамічних величин [55]. Однак домішкові атоми не тільки розширюють рівні Ландау, а й призводять до утворення локальних станів електронів [13]. Локальні рівні відщеплюються від рівнів Ландау «вниз» або «вгору», залежно від типу домішкового атома. У цьому підрозділі показано, як локалізація електронів на домішковому атому впливає на термодинамічні функції електронного газу в параболічній квантовій точці.

Розглянуто стандартну модель строго двовимірного електронного газу на площині $z = 0$, на який накладається потенціал конфайнменту. Закон дисперсії для електронів вважається ізотропним і квадратичним, а домішковий атом знаходиться у центрі квантової точки. Магнітне поле H вважається орієнтованим перпендикулярно до площини двовимірного електронного газу квантової точки.

Густину станів електронів $\nu(\varepsilon)$, як функцію енергії ε , можна представити у вигляді [23, 24, 29]:

$$\nu(\varepsilon) = \nu_0(\varepsilon) + \delta\nu(\varepsilon),$$

де ν_0 має δ -подібні максимуми на рівнях Ландау та домішковий внесок $\delta\nu$ має δ -подібні максимуми на локальних рівнях. Внесок локальних рівнів у густину станів дорівнює

$$\delta\nu(\varepsilon) = \sum_{k\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k\sigma}^l),$$

де $\varepsilon_{k\sigma}^l$ – положення k -го локального рівня електрона зі спіновим квантовим числом σ . Отже, термодинамічний потенціал електронного газу має вигляд

$$\Omega = \Omega_0 + \delta\Omega,$$

де Ω_0 – відомий внесок [54, 56], а $\delta\Omega$ – внесок локальних рівнів.

Він знаходиться за допомогою підходу Румера. Представляючи логарифм в вигляді комплексного інтегралу:

$$\delta\Omega = -\frac{T}{2i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{d\beta}{\beta \sin(\pi\beta)} \exp\left(\frac{\beta\xi'}{T}\right) \times \text{sh}^{-1}\left(\frac{\beta\omega}{2T}\right) \text{ch}\left(\frac{\beta\mu H}{T}\right), \quad (5.1)$$

де T – температура в енергетичних одиницях, $\xi' = \xi \pm \Delta$, ξ – хімічний потенціал електронів, Δ – відстань між рівнем Ландау та відщепленим від нього локальним рівнем (знаки \pm відповідають атому домішки, який притягує або відштовхує електрони), ω – гібридна частота ($\omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$), μ – спіновий магнітний момент електронів, $0 < a < 1$. Квантова стала, приймається рівною одиниці. У випадку $\Delta \propto \omega$ величина Δ не залежить від номера рівня Ландау.

Коли ξ перевищує нижню межу спектра, контур інтегрування в виразі (5.1) можна замкнути в лівій напівплощині. Тоді ми отримаємо $\delta\Omega = \delta\Omega_0 + \delta\Omega_1 + \delta\tilde{\Omega}$,

де $\delta\Omega_0$ – внесок полюса третього порядку в точці $\lambda = 0$, $\delta\Omega_1$ – внесок простих полюсів у точках $\lambda_p = p = -1, 2, \dots$, $\delta\tilde{\Omega}$ – внесок простих полюсів у точках $\lambda_r = 2\pi irT/\omega$ ($r = \pm 1, \pm 2, \dots$).

Ці внески дорівнюють:

$$\delta\Omega_0 = -\frac{\xi'^2}{\omega} \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\omega}{2\xi'} \right)^2 + \left(\frac{\mu H}{\xi'} \right)^2 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{T}{\xi'} \right)^2 \right], \quad (5.2)$$

$$\delta\Omega_1 = -T \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p} \exp\left(-\frac{p\xi'}{T}\right) \times \text{sh}^{-1}\left(\frac{p\omega}{2T}\right) \text{ch}\left(\frac{p\mu H}{T}\right), \quad (5.3)$$

$$\delta\tilde{\Omega} = 2T \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^r}{r} \text{sh}^{-1}\left(\frac{2\pi^2 r T}{\omega}\right) \times \cos\left(\frac{2\pi r \xi'}{\omega}\right) \cos\left(\frac{2\pi r \mu H}{\omega}\right), \quad (5.4)$$

Вираз (5.2) дає монотонний внесок локалізованих електронів у термодинамічний потенціал квантової точки, а формула (5.4) дає внесок, що осцилює зі зміною магнітного поля. Що стосується доданка (5.3), то за умови $\xi' \ll T$, ним можна знехтувати.

Намагніченість локалізованих електронів також містить монотонні δM_0 та осцилюючі внески $\delta\tilde{M}$. Вони дорівнюють:

$$\delta M_0 = \frac{m c \mu^2}{e} - \frac{e}{12 m c}, \quad (5.5)$$

$$\delta\tilde{M} = -\frac{4\pi\xi'T}{\omega H} \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r \text{sh}^{-1}\left(\frac{2\pi^2 r T}{\omega}\right) \times \sin\left(\frac{2\pi r \xi'}{\omega}\right) \cos\left(\frac{2\pi r \mu}{\omega}\right) \quad (5.6)$$

Тут m і e – ефективна маса і величина заряду електрона, c – швидкість світла. Перший доданок у (5.5) зумовлений парамагнетизмом, а другий — діамагнетизмом електронів, локалізованих на домішці. Внесок (5.6) отримано за умови $\xi' \ll \omega$. Частота осциляцій намагніченості (5.6) відрізняється від частоти основних коливань за рахунок квантування Ландау. Відносна різниця між цими частотами дорівнює Δ/ξ . Якщо врахувати одночасно ці внески, то в результаті на графіку залежності намагніченості від магнітного поля повинні спостерігатися биття з частотою $m c \Delta/e$, схожою на биття в масивних провідниках [23, 24].

У класичному випадку $\xi \ll T$ внесок локалізованих електронів у термодинамічний потенціал становить

$$\delta\Omega = -T \exp\left(\frac{\xi'}{T}\right) \text{sh}^{-1}\left(\frac{\omega}{2T}\right) \text{ch}\left(\frac{\mu H}{T}\right).$$

Якщо число електронів фіксоване, то хімічний потенціал електронного газу в даному випадку дорівнює

$$\xi_{\pm} = T \ln \left\{ 2\pi l^2 n_e \operatorname{sh} \left(\frac{\omega}{2T} \right) \operatorname{ch}^{-1} \left(\frac{\mu H}{T} \right) \times \right. \\ \left. \times \left[1 + 2\pi l^2 \exp \left(\pm \frac{\Delta}{T} \right) \right]^{-1} \right\},$$

де n_e – електронна густина. У цьому рівнянні верхній знак означає притягання, а нижній — відштовхування електронів домішковим атомом.

ВИСНОВКИ

Розглянута квантова точка з домішковим атомом, спроможним локалізувати електрони у магнітному полі. Функціональні методи використані для вивчення домішкових станів електронів. Ці стани враховуються в формалізмі Келдиша.

Оскільки кількість електронів у квантовій точці невелика, її властивості чутливі до зовнішнього впливу. У квантуючому магнітному полі спектр станів електронів Ландау в квантовій точці стає серіальним. Навіть один атом домішки може мати значний вплив на весь цей спектр. Продемонстровано, що домішкові атоми донорного та акцепторного типів відщеплюють локальні рівні від рівнів Ландау в квантовій точці. Відщеплення зменшується і збільшується залежно від типу домішки. Для розрахунку величини відщеплення Δ використано модель параболічної квантової точки та гауссівський сепарабельний домішковий потенціал, який дозволяє точно розв'язати задачу. Знайдені положення локальних рівнів у режимах слабого $a \gg l$ та сильного $a \ll l$ магнітного поля. Мінімум енергії відщеплення знаходиться в області проміжних полів.

Розраховані термодинамічні функції електронного газу у квантовій точці в магнітному полі з урахуванням локалізації електронів на домішковому атомі. Термодинамічний потенціал та інші величини містять монотонні та осцилюючі з магнітним полем внески, які обумовлені локалізацією електронів. Знайдено пара- та діамагнітні внески в монотонну частину намагніченості.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Chakraborty T. 1999. Quantum dots. Amsterdam: Elsevier.
2. Fock V.A. 1928. "A note on quantization of a harmonic oscillator in a magnetic field". *Z. Physik*, № 47: 446-448.
3. Darwin C.G. 1931. "The Diamagnetism of the Free Electron". *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* , № 27: 86 – 90.
4. Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N. 1998. *Quantum Dot Heterostructures*. New Jersey: John Wiley and Sons Ltd.
5. Petroff P.M. 2003. "Epitaxial Growth and Electronic Structure of Self-assembled Quantum Dots". In *Nano Science and Technology: Novel Structures and Devices*, edited by Z. Tang and P. Sheng, 67-77. Boca Raton USA: CRC Press, Taylor & Francis.
6. Pustilnik M., Glazman L.I. 2005. "Low-Temperature Conduction of a Quantum Dot". In *Quantum Dots: a Doorway to Nanoscale Physics*, edited by W. Dieter Heiss, 97-130. Berlin: Springer.
7. Golubev D.S., Semenov A.D., Zaikin A.D. 2010. "Weak localization, Aharonov-Bohm oscillations and decoherence in arrays of quantum dots". *Fizika Nizkikh Temperatur* , № 36: 1163-1183.
8. Личман О.В. Дипломна робота бакалавра "Квантові точки в магнітному полі". Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця.- Харків, 2024.-34с.
9. Reimann S. M., Manninen M. 2002. "Electronic structure of quantum dots". *Reviews of Modern Physics*, No 74: 1328 – 1342.
10. Lipparini E. 2003. *Modern Many-Particle Physics: Atomic Gases, Quantum Dots and Quantum Fluids*. New Jersey – London –Singapore – Shanghai – Hongkong – Taipei – Bangalore: WorldScientific.
11. Lifshits, Ilya; Gredeskul, Sergey; and Pastur, Leonid. 1988. *Introduction to the theory of disordered systems*, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, Singapore: Wiley-Interscience Publication. John Wiley and Sons.

12. Lifshits I.M. 1947. "On degenerate regular perturbations. I. Discrete spectrum", *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, No 17: 1017-1025.
13. Gredeksul S. A., Zusman M., Avishai Y., Azbel M. Ya. 1997. "Spectral properties and localization of an electron in a two-dimensional system with point scatterers in a magnetic field". *Physics Reports*, No 288: 223 – 257.
14. Lifshits I.M. 1987. *Selected Papers. Physics of real crystals and disordered systems*. Moscow: Nauka.
15. Kittel C. 1963. *Quantum Theory of Solids*. New York: J. Wiley and Sons Inc.
16. Doniach S., Sondheimer F.H. 1974. *Green's Functions for solid state physicists*. London: Benjamin.
17. Mahan G.D. 2000. *Many-Particle Physics (third ed.)*. New York: Kluwer-Plenum.
18. Callaway J. 1964. *Energy Band Theory*. New York: Academic Press.
19. Mrosan E., and Lemann G. 1983. "Properties of localized defects in metals". In *Ergebnisse in der Elektronen theorie der Metalle*, edited by P. Ziesche, G. Lehmann, vol. 2, 541-588. Berlin: Akademie-Verlag.
20. Maradudin A.A. 1968. *Defects and vibrational spectrum of crystals*. Moscow: Mir.
21. Kosevich A.M. 2005. *The Crystal Lattice*. Weinheim: Wiley VCH.
22. Izyumov Yu.A., Medvedev M.V. 1973. *Magnetically Ordered Crystals Containing Impurities*. New York: Consultants Bureau.
23. Ermolaev A.M., Kaganov M.I. 1967. "On the cause of beats when observing the de Haas-van Alphen effect in Bi-type metals". *JETP Letters*, No 6: 984-986.
24. Ermolaev A.M. 1968. "The effect of quasilocal states on the de Haas-van Alphen effect in Bi-type metals". *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, No 54: 1259-1263.
25. Ermolaev A.M., Kaner E.A. 1986. "Magnetoimpurity waves in metals". *JETP Letters*, No 44: 391-392.

26. Ermolaev A.M., Kaner E.A. 1987. “The weakly damped magnetoimpurity waves in metals”. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, No 92: 2245-2256.
27. Ermolaev A.M., Kaner E.A. 1987. “Surface impedance of metal with magnetoimpurity states of electrons”. *Physics of the Solid State*, No 29: 1100-1106.
28. Ermolaev A.M., Kaner E.A. 1988. “Magnetoimpurity cyclotron waves in metals”. *Low Temperature Physics*, No 14: 362-366.
29. Ermolaev Alexander. 1988. “Magnetoimpurity states of electrons in solids”. Doctor Science diss., Kharkiv University.
30. Ziman I. M. 1969. *Elements of advanced quantum theory*. Cambridge: Cambridge University Press.
31. Rickayzen G. 1980. *Green’s Functions and Condensed Matter*. London: Academic Press.
32. Economu Eleftherios N. 2006. *Green’s Functions in Quantum Physics*. Berlin – Heidelberg: Springer – Verlag.
33. Coleman, Piers. 2015. *Introduction to Many-Body Physics*. Cambridge: Cambridge University Press.
34. Negele J., Orland H. 1988. *Quantum Many-Particle Systems*. Reading (Massachusetts): Addison-Wesley.
35. Rammer J. 2007. *Quantum Field Theory of Non-equilibrium States*. Cambridge: Cambridge University Press.
36. Keldysh L. V. 1964. “Diagrammatic technique for non-equilibrium processes”. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, No 4 (10): 1515 – 1527.
37. Rammer J., Smith H. 1986. “Quantum field-theoretical methods in transport theory of metals”. *Reviews of Modern Physics*, No 58(2): 323 – 359. doi:10.1103/revmodphys.58.323

38. Kamenev A., Andreev A. 1999. "Electron-electron interactions in disordered metals: Keldysh formalism". *Physical Review B*, No 60(4): 2218 – 2238. doi:10.1103/physrevb.60.2218
39. Feigel'man M. V., Larkin A. I., Skvortsov M. A. 2000. "Keldysh action for disordered superconductors". *Physical Review B*, No 61 (18): 12361 – 12388.
40. Babichenko V. S., Kozlov A. N. 1986. "Functional method for the random-field systems with inelastic scattering". *Solid State Communications*, No 59 (1): 39 – 43. doi:10.1016/s0038-1098(86)80009-6
41. Lifshitz E. M., Pitaevskii L. P. 1981. *Physical Kinetics*. Oxford – New-York – Toronto: Pergamon Press.
42. Abrikosov A.A., Gor'kov L.P., Dzyaloshinskii I.E. 1963. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. New York: Prentice Hall – Englewood Cliffs.
43. Ermolaev A. M., Rashba G. I. 2008. "Impurity states of electrons in quantum dots in external magnetic fields". *European Physical Journal B*, No 66: 223 – 226. <https://10.1140/epjb/e2008-00392-5>.
44. Kaganov M.I., Klama S. 1978. "The role of quasilocal levels in the de Haas-van Alphen effect". *Sov. Phys. Solid State*, No 20: 1361-1366.
45. Klama S. 1980. *Teoria efektow termodynamicznych i kinetycznych w domieszkowanych polmetalach i zdegenerowanych polprzewodnikach w kwantujacym polu magnetycznym*. Warszawa: Wyd. PAN.
46. Kosevich A. M., Tanatarov L. V. 1964. "On the energy spectrum of an electron in a magnetic field in the presence of a local linear perturbation". *Fizika Tverdogo Tela (Leningrad)*, No 6: 3423 – 3434.
47. Demkov Yu. N., Ostrovskii V. N. 1988. *Zero-Range Potentials and Their Applications in Atomic Physics*. New York: Plenum.
48. Taylor J.R. 1972. *Scattering Theory*. New York: J. Wiley and Sons, INC.
49. Sitenko A. G. 1975. *Scattering Theory*. Kiev: Vishcha Shkola. [in Russian]

50. Bateman H., Erdelyi A. 1953. Higher Transcendental Functions (vol. 1). New York: Mc Graw-Hill Book Company.
51. Bataka E. P., Ermolaev A. M. 1983. "Impurity levels of a two-dimensional electron gas in a magnetic field". Russian Physics Journal, No 1: 111 – 112.
52. Landau L.D., Lifshitz E.M. 1976. Quantum mechanics: nonrelativistic theory. Oxford: Butterworth-Heinemann.
53. Wolfram T., Callaway J. 1963. "Spin-Wave Impurity States in Ferromagnets". Physical Review, No 130: 2207-2217.
doi:10.1103/physrev.130.2207
54. Shoenberg D. 1984. "Magnetization of a two – dimensional electron gas". Journal of Low Temperature Physics, No 56 (5/6): 417 – 440.
55. Ando T., Fowler A., Stern F. 1985. Electronic Properties of Two-Dimensional Systems. New York: American Physical Society.
56. Isihara A., Kojima D. Y. 1979. "Study of two-dimensional electrons in a magnetic field. II. Intermediate field". Physical Review B, No 19 (2): 846 – 855. doi:10.1103/physrevb.19.846