

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.

_____ 2024 р.

_____ 2024 р.

Личман Олександр Володимирович

Квантові точки у магнітному полі

Кваліфікаційна робота
на здобуття освітнього ступеня
«Бакалавр» 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 2024

АНОТАЦІЯ

Розглянуто властивості квантової точки з параболічним потенціалом конфайнменту в магнітному полі. Як модель квантової точки, обраний двовимірний електронний газ в магнітному полі, обмежений параболічним потенціалом конфайнменту. Обчислені хвильова функція та енергетичний спектр, великий термодинамічний потенціал, магнітний момент системи, число частинок. Вивчаються можливі прояви орбітального магнетизму та спінового магнетизму в різних режимах температур і магнітного поля.

Ключові слова: квантова точка, двовимірний електронний газ, потенціал конфайнменту, термодинамічні функції, магнітне поле.

ABSTRACT

Properties of quantum dots with a parabolic confinement potential in a magnetic field are considered. Two dimensional electron gas in a magnetic field, limited by a parabolic confinement potential, is chosen as a quantum dot model. Wave function, energy spectrum, the grand potential, magnetic moment of the system and the number of particles were calculated. Possible manifestations of orbital magnetism and spin magnetism in different temperature and magnetic field modes are looked upon.

Key words: quantum dots, two dimensional electron gas, confinement potential, thermodynamical functions, magnetic field.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1.....	8
АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	8
РОЗДІЛ 2 МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ.....	11
РОЗДІЛ 3.....	15
ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ	15
РОЗДІЛ 4.....	24
ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ.....	25
4.1. Термодинамічні функції	25
4.2. Магнетизм в різних режимах температур та магнітного поля	31
ВИСНОВОК	33
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	34

ВСТУП

Квантова точка, ще відома як штучний атом [1, 2] – це наносистема, що складається з електронів-провідників, обмежених потенціалом конфайнменту в певному об'ємі. Потенціал конфайнменту обмежує рух електронів квантової точки в усіх напрямках і його накладання є основною проблемою в їх створенні. Накласти потенціал допомагає технологія молекулярно-променевої епітаксії. Цей метод дозволяє створювати структури з одновимірним електронним газом, такі як квантові дроти та квантові точки.

Енергетичний спектр електронів ізольованої квантової точки це набір дискретних рівнів квантування [1], тому її можна розглядати як великий штучний атом параметрами якого можна керувати. Регулювати можна такі параметри як глибина потенційної ями, природа потенціалу конфайнменту, число електронів та розмір області локалізації електронів.

Підвищена цікавість дослідження наноструктур в тому числі квантових точок полягає в їх застосуванні в мікроелектроніці [1]. Через постійне бажання зменшувати розміри пристроїв, збільшувати швидкість їх обчислення, фізика твердого тіла перетворилась на фізику наносистем. Ці наносистеми цікаві не тільки як елементи сучасних пристроїв, а ще й тим що вони демонструють квантові ефекти. Квантова механіка необхідна для подальшого прогресу майбутніх технологій. Дослідження напівпровідникових наноструктур за допомогою квантової механіки призвело до появи таких класів пристроїв, як резонансні тунельні діоди, транзистори, які мають обширний діапазон застосування. Великий інтерес зараз прикований до задачі створення квантових інтегральних схем та квантових комп'ютерів, елементами яких будуть квантові точки, ями, дроти та нанотрубки.

Особливо цікавим є те, як поведуть себе наносистеми в магнітному полі. Магнітне поле призводить до ефектів гібридизації розмірного і магнітного

квантування електронів. До числа цих ефектів входить квантовий ефект Холла в двовимірному електронному газі.

Для теоретика квантові точки цікаві тим, що на них можна випробувати нові методи обчислення. Великий інтерес представляють собою властивості квантових точок з домішковими атомами в магнітному полі. Через те що в квантовій точці невелика кількість електронів наявність навіть одного домішкового атому впливає на її властивості. Проявляються ефекти гібридизації просторового і магнітного квантування руху електронів.

Розв'язана у роботі задача – являє собою складову частину в дослідженні квантових точок, актуальних об'єктів дослідження в фізиці наносистем. В роботі передбачається обчислити термодинамічні величини двовимірного електронного газу в магнітному полі на які діє обмежуючий потенціал, розглянути можливі прояви магнетизму в різних режимах температур і магнітного поля.

Об'єкт дослідження – двовимірний електронний газ обмежений потенціалом конфайнменту в магнітному полі, а саме квантові точки.

Предметом дослідження є термодинамічні властивості квантової точки в магнітному полі.

Мета роботи – обчислення термодинамічних функцій двовимірного електронного газу обмеженого утримуючим потенціалом в магнітному полі, розгляд проявів орбітального та спінового магнетизму в різних режимах температур і магнітного поля.

Практична цінність отриманих під час роботи результатів в тому, що наносистеми як квантові точки являються важливими елементами багатьох сучасних пристроїв і розв'язана задача буде сприяти розвитку майбутніх технологій.

Достовірність результатів роботи можна підтвердити тим, що під час виконання роботи були використані відомі методи статистичної фізики. Отримані результати науково обґрунтовані використанням сучасної наукової літератури в галузі квантових точок.

РОЗДІЛ 1

АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

За останні десятиліття низьковимірні наносистеми визначили нову галузь досліджень в фізиці конденсованого стану. Сучасні методи обробки напівпровідників дозволили штучно створювати квантовий конфайнмент лише декількох електронів. Такі скінченні ферміонні системи мають багато спільного з атомами, але все ж таки це системи створені людиною в лабораторних умовах. Зазвичай їх називають “квантовими точками”, відповідно до їх квантового обмеження в трьох просторових вимірах. Популярний метод створення квантових точок – це обмежити двовимірний електронний газ в напівпровідниковій гетероструктурі по бокам електростатичними затворами, або вертикально використовуючи техніки травлення. Це створює чашоподібний потенціал в якому електрони провідники “захоплені”. В доданок до багатьох можливих технологічних застосувань, що робить дослідження цих “штучних атомів” або “дизайнерських атомів” [1] цікавим це різноманітні аналогії до систем що існують в природі і мають визначені парадигми фізики багатьох частинок: атоми, ядра, металічні кластери. Квантові точки додають ще одну таку парадигму. Їх властивості можна контролювано змінювати електростатичними затворами, змінами в точковій геометрії, або дією магнітного поля. Їх технологічна реалізація надала доступ до квантових ефектів в скінченних малорозмірних системах, які ще мало досліджені.

Після початкового успіху в створенні та керуванні мезоскопічними напівпровідниковими структурами, які зазвичай розміром в 100 нанометрів і обмежують в собі сотні електронів, багато груп вчених приділили увагу до подальшої мініатюризації цих пристроїв. Прорив до “атомного” режиму був досягнутий експериментальним відкриттям оболонкової структури в флуктуаціях енергетичних спектрів що заряджаються, малих, вертикальних квантових точок: межа між фізикою об’ємної конденсованої речовини та

квантовими системами декількох тіл була стерта. Більшість фізики декількох тіл, що розвивалась для розуміння атомів або ядер можна було застосовувати. Вимірювання штучних атомів дали велику кількість даних з яких було отримано фундаментальні пізнання в фізику багатьох тіл малорозмірних скінченних ферміонних систем. З подальшим прогресом в експериментальних методах, штучні атоми будуть продовжувати бути багатим джерелом інформації щодо фізики багатьох частинок.

Галузь наноструктурної фізики в останні роки розвивалася дуже швидко і багато теоретичних пізнань було отримано одночасно з прогресом в експериментальних методах і більше технологічно орієнтованих застосуваннях.

В книзі Т. Чакраборті [1] було розглянуто оптичні і електронні властивості квантових точок. Розглядаються методи їх отримання, типи оптоелектронних пристроїв до складу яких входять квантові точки. Досліджено квантові точки за модель яких взято двовимірний електронний газ на межі GaAs-AlGaAs. Використано параболічний конфайнмент Фока-Дарвіна [3, 4]. Магнітне поле перпендикулярне до площини двовимірного електронного газу. Розглянуто вплив домішкових атомів у квантових точках, що розсіюють електрони.

В роботі [5] розглянуто нові методи синтезу квантових точок такі, як епітаксійне вирощування, метод літографії.

В монографії [2] розглядаються властивості квазі-двовимірних напівпровідникових квантових точок. Експериментальні методи для вимірювання електронної оболонкової структури і вплив магнітного поля були описані. Електронна структура аналізується з точки зору простих одночастинкових моделей, теорії функціоналу густини і точних методів діагоналізації. Розглянуто спонтанну магнетизацію завдяки правилу Хунда, спин-щільність хвильові стани, локалізацію електронів. Як функція магнітного

поля, електронна структура проходить через декілька фаз з якісно різними властивостями. Досліджено скінченні точки під дією сильного магнітного поля. Розглянуто деформовані точки і точкові молекули.

Доцільність поставленої мети дослідження – розглянути властивості квантової точки в магнітному полі обґрунтовується суттєвим впливом поля на її фізичні характеристики.

Перелік завдань, які необхідно виконати для досягнення мети:

- 1.Розглянути гамільтоніан квантової точки в магнітному полі з параболічним потенціалом конфайнменту.
- 2.Розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера у квантовій точці та отримати енергетичний спектр електрона у квантовій точці.
- 3.Розрахувати великий термодинамічний потенціал квантової точки.
- 4.Розрахувати магнітний момент системи.
- 5.Розрахувати середнє число електронів.
- 6.Розглянути прояви орбітального та спінового магнетизму при різних режимах температури і магнітного поля.

РОЗДІЛ 2

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Двовимірний електронний газ можна отримати за допомогою інверсивних шарів. Інверсійні шари з'являються на межі розділу між напівпровідником Si і діелектриком SiO_2 , або між двома напівпровідниками один з яких виступає як діелектрик $Al_xGa_{1-x}As$, напівпровідник в цьому випадку $GaAs$, де $x = 0,8$. Буде розглядатись польовий транзистор з Al в якості затвору. Електрони з кремнію притягуються до межі розділу провідник-діелектрик і потрапляють в квантову яму, яка створюється електричним полем та поверхнею. Квантова яма має трикутний характер і поділена на рівні. Рух електронів здійснюється перпендикулярно до границі розділу та він є квантованим. Електрони можуть займати нижні рівні ями. Електрони на нижньому рівні рухаються паралельно границі, це і є двовимірний електронний газ. Електрон, як квантова частинка має довжину хвилі де Бройля і ця довжина хвилі де Бройля достатньо велика, що працює модель електронів з ефективною масою m_* . Товщина шару SiO_2 приблизно 5000 ангстрем. Затвор польового транзистору позитивно заряджений за рахунок батареї V_G . Змінюючи напругу V_G було показано, що можна змінювати густину електронів на границі.

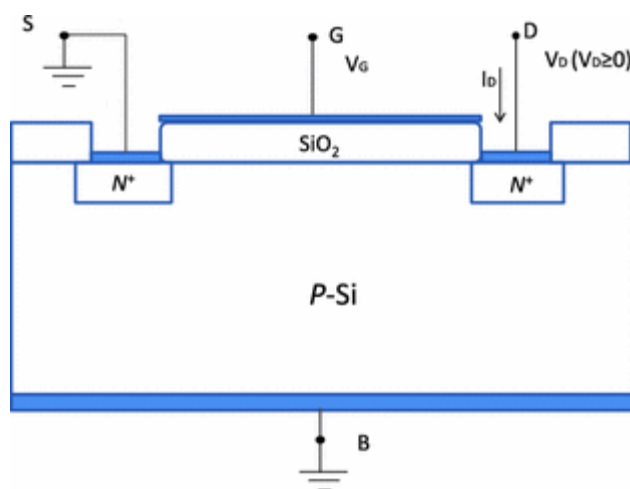


Рисунок 2.1. Польовий транзистор

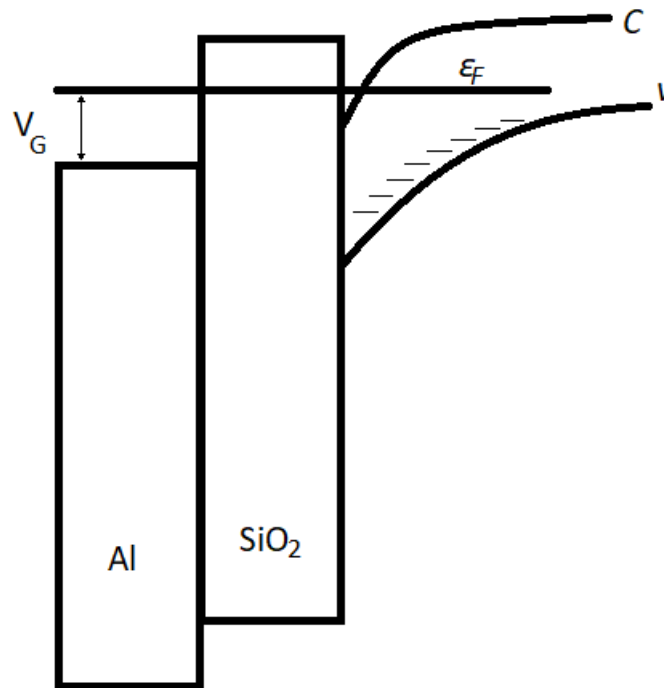


Рисунок 2.2. Енергетична структура

Електрони рухаються в область з мінімальною енергією і тому зони вигибаються вниз. Електричне поле затвору вигибає зони. В кремнії частина електронів з валентної зони v локалізуються на акцепторних домішках, тоді в валентній зоні залишаються вільні міста, так звані дірки. Коли зона провідності C рухається нижче ніж енергія фермі, з'являється інверсійний шар. Ширина інверсійного шару приблизно 25 ангстрем, рухливість електронів приблизно $40000 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Дірки з мінімальною енергією знаходяться у вершини валентної зони, таким чином енергія фермі достатньо близька до цієї вершини. Притягнуті до границі межі електрони заповнюють діркові стани. Оскільки накопичуються електрони, з'являється негативний заряд біля границі і його густина дорівнює густині акцепторів у кремнії p-Si. Якщо збільшувати напругу і зробити достатньо великою, тоді дно зони провідності буде рухатись нижче ніж енергія фермі, і тоді електрони зони провідності будуть розташовані нижче енергії фермі. Шар в якому дно зони провідності знаходиться нижче стелі валентної зони називається інверсійним. Якщо використовувати напівпровідники n-типу і змінити знак напруги то тоді

отримуємо дірковий інверсійний шар. Границя гетеропереходу відіграє роль двовимірного електронного газу.

Зони які не мають об'ємного заряду присутні, коли існує легований напівпровідник n-типу, в ньому електрони знаходяться в зоні провідності. Ці електрони мігрують заповнюючи діркові стани в валентній зоні GaAs, а більшість з цих електронів накопичуються біля дна зони провідності GaAs. Тобто позитивний заряд який залишається на донорах притягує електрони з GaAs, що підтверджує вигибання цих зон, електрони з GaAs рухаються до границь де їх енергія стає мінімальною, таким чином створюється електричне поле в системі. Перехід електронів від AlAs до GaAs відбувається до тих пір поки поле дипольного шару який, створюється позитивно зарядженими донорами та електронами інверсійного шару у границі GaAs, достатньо велике. Цей дипольний шар створює стрибок потенціалу, який вирівнює рівні фермі AlAs і GaAs. Можна створити обернений затвор і можна керувати густиною електронів в інверсійному шарі. Густина електронів в інверсійному шарі визначається густиною донорів в AlAs.

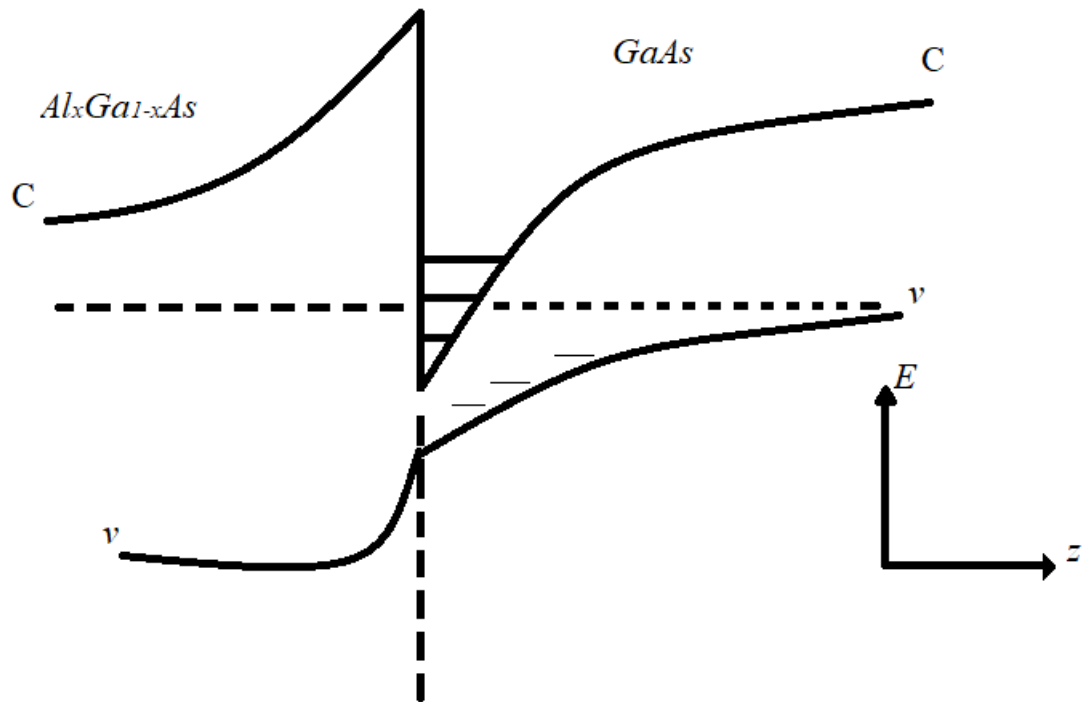


Рисунок 2.3. Тунелювання електронів через бар'єр

Донорні електрони тунелюють через бар'єр з AlAs в GaAs. Вони займають нижню підзону в ямі інверсійного шару в зоні провідності. Товщина інверсійного шару приблизно 100 ангстрем, рухливість $\mu \sim 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Модельоване легування - це впровадження донорів в AlAs, який в даному випадку віддалений від границі. В техніці цей метод має назву молекулярно променевої епітаксії і він дозволяє отримати мінімальну концентрацію донорів в AlAs на деякому віддаленні від границь. При цьому це віддалення домішкового шару від границі може бути приблизно 100 ангстрем, це збільшує рухливість електронів в інверсійному шарі. В GaAs ефективна маса електрона $m_* = 0,07m_e$.

РОЗДІЛ 3

ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Ідея дипломної роботи продиктована роллю енергетичного спектру квантової точки. Енергетичний спектр дозволяє в подальшому визначити її фізичні характеристики, такі як густина розподілу, число частинок, великий термодинамічний потенціал, магнітний момент системи.

Розглянемо двовимірний електронний газ, який обмежує рух електронів в площині (x, y) . Маса і заряд електрона m_* та $e = -|e|$. Магнітне поле $\vec{H}$ направлене перпендикулярно до площини. Ще на систему електронів діє обмежуючий потенціал конфайнменту:

$$U(r) = \frac{m_* \omega_0^2 r^2}{2}, \quad (3.1)$$

де ω_0 – параметр потенціала конфайнменту, $\vec{r}$ – двовимірний радіус вектор.

Під дією поля (3.1) електрони утворюють квантову точку. Розглянемо квантову точку в магнітному полі.

Стаціонарні стани електронів знайдемо з рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi, \quad (3.2)$$

де ψ – хвильова функція стаціонарних станів електронів, $\hat{H}$ – оператор Гамільтона. Він дорівнює [6]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_*} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + U(\vec{r}), \quad (3.3)$$

де ∇ – двовимірний оператор набла, $\vec{A}$ – векторний потенціал, c – швидкість світла у вакуумі.

Відомо що вектор напруженості магнітного поля дорівнює:

$$\vec{H} = \text{rot}\vec{A}.$$

Обираємо векторний потенціал поля у вигляді [6]:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H} \vec{r}], \quad (3.4)$$

В гамільтоніані (3.3) не врахована взаємодія магнітного моменту електронів з магнітним полем, яка описується виразом:

$$-\hat{\sigma}_z \mu_B \vec{H}, \quad (3.5)$$

де $\mu_B = \frac{g}{2} \frac{|e|\hbar}{2m_*}$ - спіновий магнітний момент електрона (g – фактор Ланде),

$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ – третя матриця Паулі.

Рівняння (3.2) будемо розв'язувати в полярних координатах (r, φ) . В цих координатах компоненти векторного потенціалу поля мають наступний вигляд: $A_r = 0$, $A_\varphi = \frac{1}{2} H r$, $A_z = 0$. Підставляючи рівняння (3.3) в рівняння (3.2) отримуємо:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_*} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{1}{8} m_* \omega_c^2 r^2 \psi + \frac{m_* \omega_0^2 r^2}{2} \psi = \varepsilon \psi \quad (3.6)$$

де $\omega_c = \frac{|e|\hbar}{m_* c}$ – циклотронна частота електрона.

Оскільки система аксиально симетрична розв'язок рівняння будемо шукати у вигляді:

$$\psi(r, \varphi) = R(r) \frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.7)$$

де R – радіальна хвильова функція, m – магнітне квантове число ($\hbar m$ – проекція орбітального кутового моменту на магнітне поле). З квантової механіки відомо, що $m = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$ [6]. Оскільки проекція моменту на вісь Z зберігається, зберігається й проекція спінового моменту. Збереження M_z впливає із тотожності нулю комутатора $[\hat{M}_z, \hat{H}] = 0$,

де $\hat{M} = [\vec{r}, \hat{p}]$.

Підставляємо (3.7) в (3.6) і отримуємо рівняння для $R(r)$:

$$R'' + \frac{1}{r}R' - \frac{m^2}{r^2}R + \frac{2m_*}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_*\omega_0^2 r^2}{8} - \frac{1}{8}m_*\omega_c^2 r^2 + \frac{1}{2}\hbar\omega_c m \right] R = 0.$$

Штрихами позначаємо похідні по r . Введемо гібридну частоту $\omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$, тоді отримуємо:

$$R'' + \frac{1}{r}R' - \frac{m^2}{r^2}R + \frac{2m_*}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_*\omega^2 r^2}{8} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c m \right] R = 0, \quad (3.9)$$

Введемо нову змінну $\xi = \frac{r^2}{2l^2}$, де $l = \sqrt{\frac{c\hbar}{|e|H}}$ – магнітна довжина.

Тоді отримуємо похідні:

$$\begin{aligned} \frac{dR}{dr} &= \frac{dR}{d\xi} \frac{d\xi}{dr} = \frac{dR}{d\xi} \frac{r}{l^2} = \frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2l^2\xi}}{l^2} = \frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2\xi}}{l}, \\ \frac{d^2R}{dr^2} &= \frac{d}{dr} \left(\frac{dR}{dr} \right) = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2\xi}}{l} \right) \frac{d\xi}{dr} = \frac{d}{d\xi} \left(\frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2\xi}}{l} \right) \frac{\sqrt{2\xi}}{l} = \\ &= \frac{d^2R}{d\xi^2} \frac{2\xi}{l^2} + \frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2}}{l} \frac{1}{2\sqrt{\xi}} \frac{\sqrt{2\xi}}{l} = \frac{d^2R}{d\xi^2} \frac{2\xi}{l^2} + \frac{dR}{d\xi} \frac{1}{l^2}. \end{aligned}$$

Підставляємо ці похідні в (3.9):

$$\frac{d^2R}{d\xi^2} \frac{2\xi}{l^2} + \frac{dR}{d\xi} \frac{1}{l^2} + \frac{1}{l\sqrt{2\xi}} \frac{dR}{d\xi} \frac{\sqrt{2\xi}}{l} - \frac{m^2}{2\xi l^2} R + \frac{2m_*}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_*\omega^2 2\xi l^2}{8} + \frac{\hbar\omega_c m}{2} \right] R = 0$$

Домножаючи це рівняння на $\frac{l^2}{2}$ отримуємо:

$$\xi \frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dR(\xi)}{d\xi} + \left(-m^2 \frac{1}{4\xi} \right) R(\xi) + \frac{2m_* l^2}{\hbar^2} \left[\varepsilon - \frac{m_*\omega^2}{8} 2\xi l^2 + \frac{\hbar\omega_c m}{2} \right] R = 0.$$

Враховуючи вирази:

$$\frac{m_* l^2}{\hbar^2} = \frac{m_* c \hbar}{|e| H \hbar^2} = \frac{1}{\hbar\omega_c},$$

$$\frac{1}{\hbar\omega_c} \frac{m_*\omega^2 \xi l^2}{4} = \frac{1}{\hbar\omega_c} \frac{m_*\omega^2}{4} \xi \frac{c\hbar}{|e|H} = \frac{1}{4\omega_c^2} \xi^2,$$

$$\frac{1}{\hbar\omega_c} \frac{\hbar\omega_c}{2} m = \frac{m}{2}$$

запишемо рівняння (3.9) в наступному вигляді:

$$\xi \frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dR(\xi)}{d\xi} + \left[-\frac{\xi}{4} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 + \beta - \frac{m^2}{4\xi} \right] R = 0, \quad (3.10)$$

де за визначенням

$$\beta = \frac{\varepsilon}{\hbar\omega_c} + \frac{m}{2}. \quad (3.11)$$

Якщо $\xi \rightarrow 0$, то в цьому рівнянні залишаємо основні члени:

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} + \frac{dR}{d\xi} - \frac{m^2}{4\xi} R = 0, \quad (3.12)$$

Рішення (3.12) шукаємо у вигляді $R(\xi) \sim \xi^\alpha$. Тоді:

$$\frac{dR}{d\xi} \sim \alpha \xi^{\alpha-1}; \quad \frac{d^2 R}{d\xi^2} \sim \alpha(\alpha-1) \xi^{\alpha-2},$$

$$\xi \alpha(\alpha-1) \xi^{\alpha-2} + \alpha \xi^{\alpha-1} - \frac{m^2}{4\xi} \xi^\alpha = 0,$$

$$\alpha(\alpha-1) + \alpha - \frac{m^2}{4} = 0,$$

$$\alpha^2 = \frac{m^2}{4}, \quad \alpha = \pm \frac{|m|}{2}.$$

Знак мінус потрібно відкинути, інакше $R \xrightarrow{\xi \rightarrow 0} \infty$. Хвильова функція повинна

бути скінченною всюди. Отримуємо $R(\xi) \sim \xi^{\frac{|m|}{2}}$ при $\xi \rightarrow 0$.

Тепер нехай $\xi \rightarrow \infty$. Залишимо основні члени в (3.10):

$$\xi \frac{d^2 R}{d\xi^2} - \frac{\xi}{4} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 R = 0, \quad (3.13)$$

Розв'язання повинне спадати на нескінченності $R \sim e^{-\xi\gamma}$. Підставляючи це рішення в (3.13), знаходимо:

$$\frac{dR}{d\xi} = -\gamma e^{-\xi\gamma}; \quad \frac{d^2R}{d\xi^2} = \gamma^2 e^{-\xi\gamma}$$

$$\gamma^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 = 0$$

$$\gamma = \pm \frac{\omega}{2\omega_c}$$

Потрібно обрати знак мінус щоб рішення спадало на нескінченності. Тому

$$R \sim e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}}.$$

Радіальна хвильова функція має наступний вигляд:

$$R(\xi) = \xi^{\left|\frac{m}{2}\right|} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W(\xi), \quad (3.14)$$

Виконаємо підстановку (3.14) в (3.10):

$$\frac{dR}{d\xi} = \frac{m}{2} \xi^{\frac{m}{2}-1} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W - \xi^{\frac{m}{2}} \left(\frac{1\omega}{2\omega_c} \right) e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W + \xi^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W'$$

$$W' = \frac{dW(\xi)}{d\xi},$$

$$R'' = \frac{d^2R(\xi)}{d\xi^2} =$$

$$\begin{aligned} &= \frac{m}{2} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \xi^{\frac{m}{2}-2} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W + \frac{m}{2} \left(-\frac{\xi\omega}{2\omega_c} \right) \xi^{\frac{m}{2}-1} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W \\ &+ \frac{m}{2} \xi^{\frac{m}{2}-1} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W' - \frac{m}{2} \xi^{\frac{m}{2}-1} \frac{\omega}{2\omega_c} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W + \xi^{\frac{m}{2}} \frac{1}{4} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^2 e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W \\ &- \xi^{\frac{m}{2}} \frac{\omega}{2\omega_c} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W' + \frac{m}{2} \xi^{\frac{m}{2}-1} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W' - \xi^{\frac{m}{2}} \frac{\omega}{2\omega_c} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_2}} W' \\ &+ \xi^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{\xi\omega}{2\omega_c}} W''. \end{aligned}$$

Після підстановки та скорочень отримуємо рівняння для $W(\xi)$:

$$\xi W'' + \left(|m| + 1 - \frac{\omega}{\omega_c} \xi\right) W' - \left[\frac{1}{2} \frac{\omega}{\omega_c} (|m| + 1) - \beta\right] W = 0.$$

Введемо нову змінну $U = \frac{\omega}{\omega_c} \xi$. Тоді:

$$\frac{dW}{d\xi} = \frac{dW}{dU} \frac{dU}{d\xi} = \frac{dW}{dU} \frac{\omega}{\omega_c},$$

$$\frac{d^2W}{d\xi^2} = \frac{d}{dU} \left(\frac{dW}{dU} \frac{\omega}{\omega_c} \right) \frac{dU}{d\xi} = \frac{d^2W}{dU^2} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right)^2,$$

$$\xi W'' = U \frac{d^2W}{dU^2} \left(\frac{\omega}{\omega_c} \right); \quad W' = \dot{W} \frac{\omega}{\omega_c}; \quad \dot{W} = \frac{dW}{dU},$$

$$U \frac{d^2W}{dU^2} + (|m| + 1 - U) \frac{dW}{dU} - \left[\frac{1}{2} (|m| + 1) - \frac{\omega_c}{\omega} \beta \right] W = 0.$$

Таким чином отримуємо рівняння для $W(U)$:

$$U \frac{d^2W}{dU^2} + (\gamma - U) \frac{dW}{dU} - \alpha W(U) = 0, \quad (3.15)$$

де $\gamma = |m| + 1$,

$$\alpha = \frac{1}{2} (|m| + 1) - \frac{\omega_c}{\omega} \beta. \quad (3.16)$$

Враховуємо зв'язок змінних:

$$U = \frac{\omega}{\omega_c} \frac{r^2}{2l^2} = \frac{\omega}{\omega_c} \xi = \frac{r^2}{2} \frac{\omega m_*}{\hbar} = \frac{1}{2} \left(\frac{r}{2l_*} \right)^2.$$

Тут вводиться перенормована магнітна довжина $l_* = \sqrt{\frac{\hbar}{m_* \omega}}$, $\omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$.

Рівняння (3.15) відоме в математичній фізиці [7]. Це є рівняння виродженої гіпергеометричної функції $\Phi(\alpha, \gamma, z)$ [6, 7]:

$$z \frac{d^2\Phi}{dz^2} + (\gamma - z) \frac{d\Phi}{dz} - \alpha \Phi = 0.$$

Представлення виродженої гіпергеометричної у вигляді ряду [6, 7]:

$$\Phi(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)z^2}{\gamma(\gamma+1)2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)z^3}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)3!} + \dots$$

Рішення рівняння (3.15): $W(U) = \Phi(\alpha, \gamma, U)$.

Радіальна хвильова функція дорівнює:

$$R = A \left(\frac{r^2}{2l^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\omega}{\omega_c} \frac{r}{l^2}} \Phi \left(\frac{1}{2} (|m| + 1) - \frac{\omega}{\omega_c} \beta, |m| + 1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{l_*} \right)^2 \right)$$

де A – нормувальна константа.

Здійснюючи нормування (3.7): $\int d^2r |\psi|^2 = 1$, де $\int_0^\infty dr r |R|^2 = 1$.

Щоб $R(n)$ була завжди скінченною, вираз $\frac{\omega}{\omega_c} \beta - \frac{1}{2} (|m| + 1) = n$, повинен дорівнювати $n_r = 1, 2, 3, \dots$. Тут n_r – радіальне квантове число. З урахуванням (3.11) знаходимо енергію електрона в квантовій точці в магнітному полі:

$$\frac{\varepsilon}{\hbar \omega_c} = \beta - \frac{m}{2} = \frac{\omega}{\omega_c} \left[n_r + \frac{1}{2} (|m| + 1) \right] - \frac{m}{2},$$

або

$$\begin{aligned} \varepsilon(n_r, m) &= \hbar \omega \left[n_r + \frac{1}{2} (|m| + 1) \right] - \hbar \omega_c \frac{m}{2} = \hbar \omega \left(n_r + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar \omega}{2} |m| - \frac{\hbar \omega_c}{2} m = \\ \hbar \omega \left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{|m|}{2} - \frac{\omega_c}{\omega} \frac{m}{2} \right) &= \hbar \omega \left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{|m| - \frac{\omega_c}{\omega} m}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Оскільки число $n_r = 0, 1, 2, \dots = \frac{\omega}{\omega_c} \beta - \frac{1}{2} (|m| + 1) = \frac{\omega_c}{\omega} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar \omega_c} + \frac{m}{2} \right) - \frac{1}{2} (|m| + 1)$.

Отримуємо спектр який нагадує спектр гармонійного лінійного осцилятора в квантовій механіці $\varepsilon = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$, $n = 0, 1, 2, \dots$

де $n = n_r + \frac{1}{2} \left(|m| - \frac{\omega_c}{\omega} m \right)$.

Існує зв'язок Φ з поліномами Лагерра [7]:

$$L_n^\alpha = \binom{n+\alpha}{n} \Phi(-n, \alpha+1, x)$$

$$\text{де } \binom{p}{n} = \frac{p(n-1)\dots(p-n+1)}{n!}, \binom{p}{0} = 1$$

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+\alpha})$$

$$L_n^0(x) = L_n(x), L_0^\alpha(x) = 1, L_n^\alpha(0) = \binom{n+\alpha}{n}$$

$$\text{Якщо в (3.7) взяти } e^{im\varphi}, \text{ то отримуємо } \varepsilon(n_r, m) = \hbar\omega \left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{|m| - \frac{\omega}{\omega_c} m}{2} \right).$$

Нормуємо (3.17):

$$\begin{aligned} R(r) &= A \left(\frac{r^2}{2l^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{\omega}{\omega_c} \frac{r^2}{2l^2}} \Phi \left(\frac{|m|+1}{2} - \frac{\omega_c}{\omega} \beta, |m|+1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{l_*} \right)^2 \right) \\ &= A \left(\frac{r^2}{2l^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{r}{l_*} \right)^2} \Phi \left(-n_r, |m|+1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{l_*} \right)^2 \right). \end{aligned}$$

Використовуючи зв'язок між L та Φ [7]:

$$\binom{n_r + |m|}{n_r} \Phi \left(-n_r, |m|+1, \frac{1}{2} \left(\frac{r}{l_*} \right)^2 \right) = L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right)$$

Тоді:

$$\begin{aligned} R(r) &= A \left(\frac{r^2}{2l} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{1}{4} \frac{r^2}{l_*^2}} \frac{1}{\binom{n_r + |m|}{n_r}} L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right) = \\ &= B \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4l_*^2}} \frac{1}{\binom{n_r + |m|}{n_r}} L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right) = \\ &= C \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4l_*^2}} L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right). \end{aligned}$$

Умова нормування $\int_0^\infty dx x^{|m|} e^{-x} [L_{n_r}^{|m|}]^2 = 1$

$$x = \frac{r^2}{2l_*^2}.$$

В довіднику [8] можна знайти наступний вираз:

$$\int_0^\infty dx x^\alpha e^{-x} [L_n^\alpha(x)]^2 = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n!}, \operatorname{Re} \alpha > 0.$$

Відповідно:

$$D^2 \frac{\Gamma(\alpha + n_r + 1)}{n_r!} = D^2 \frac{(n_r + |m|)!}{n_r!} = 1,$$

$$D = \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |m|)!}}.$$

Використовуючи умову нормування:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr r R^2(r) &= \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\infty dr^2 c^2 \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4l_*^2}} \left(L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right) \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} c^2 2l_*^2 \int_0^\infty dx x^{|m|} e^{-x} [L_{n_r}^{|m|}(x)]^2 = c^2 l_*^2 \frac{(n_r + |m|)!}{n_r!} = 1, \end{aligned}$$

$$c = \frac{1}{l_*} \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |m|)!}}.$$

В результаті нормована радіальна хвильова функція має вигляд:

$$R(r) = \frac{1}{l_*} \sqrt{\frac{n_r!}{(n_r + |m|)!}} \left(\frac{r^2}{2l_*^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} e^{-\frac{r^2}{4l_*^2}} L_{n_r}^{|m|} \left(\frac{r^2}{l_*^2} \right).$$

З урахуванням електронного спіну, енергетичний спектр електрона в квантовій точці має вигляд:

$$\varepsilon(n_r, m, \sigma) = \hbar\omega \left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left[|m| - \frac{\omega_c}{\omega} m \right] + \sigma \mu_B H \right).$$

РОЗДІЛ 4

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

4.1. Термодинамічні функції

Враховуючи підвищену зацікавленість фізиків до вивчення систем із двовимірним електронним газом та застосування цих систем у техніці, розглянемо властивості двовимірного електронного газу в квантуючому магнітному полі, обмеженого потенціалом конфайнменту. Далі буде використовуватись підхід статті [9].

Нехай електрони випробовують рух у площині $z = 0$, маса електронів m , заряд $-|e|$. Векторний потенціал обираємо у вигляді:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} [\vec{H}, \vec{r}].$$

Потенціал конфайнменту системи є параболічним:

$$U(r) = \frac{m\omega_0^2}{2} r^2.$$

Гамільтоніан електрона у квантовій точці має наступний вигляд:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} + \frac{|e|\hbar}{c} \vec{A} \right)^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} r^2 + \hat{\sigma} \mu_B H, \quad (4.1)$$

де $\vec{r}$ і $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$ - двовимірні вектори, $\hat{\sigma}$ – третя матриця Паулі. На відміну від статті [9] в дипломній роботі враховується третій доданок в гамільтоніані (4.1), який обумовлений взаємодією спіна електрону з магнітним полем.

Гамільтоніан (4.1) можна діагоналізувати переходом від операторів $\hat{p}$, $\vec{r}$ до $\hat{a}_1, \hat{a}_2$ і їх ермітово спряжених $\hat{a}_1^\dagger, \hat{a}_2^\dagger$ [9]:

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{2} \left[\frac{x}{l_0} + \frac{l_0}{\hbar} \hat{p}_y + i \left(-\frac{y}{l_0} + \frac{l_0}{\hbar} \hat{p}_x \right) \right],$$

$$\hat{a}_2 = \frac{1}{2} \left[\frac{x}{l_0} - \frac{l_0}{\hbar} \hat{p}_y + i \left(\frac{y}{l_0} + \frac{l_0}{\hbar} \hat{p}_x \right) \right],$$

де $l_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$, $\omega = \sqrt{\omega_c^2 + 4\omega_0^2}$, ω_c – циклотронна частота. В цих змінних гамільтоніан має наступний вигляд:

$$\hat{H} = \hbar\omega_+ \left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_- \left(\hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + \frac{1}{2} \right) + \hat{\sigma}\mu_B H, \quad (4.2)$$

де $\omega_{\pm} = \frac{1}{2}(\omega \pm \omega_c)$.

Оператор Гамільтона (4.2) виглядає як сума гамільтоніанів двох лінійних гармонічних осциляторів з частотами $\omega_{\pm}$. Його енергетичний спектр дорівнює:

$$\varepsilon(n_1, n_2, \sigma) = \hbar\omega_+ \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_- \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \sigma\mu_B H, \quad (4.3)$$

де $n_{1,2} = 0, 1, \dots, \sigma = \pm 1$.

Великий термодинамічний потенціал електронів Ω можна записати наступним чином [10]:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \text{Sp} \ln(1 + e^{\beta(\mu - \hat{H})}), \quad (4.4)$$

де Sp – сума за квантовими числами n_1, n_2, σ . Щоб обчислити потенціал Ω потрібно скористатися фур'є предсталвленням гіперболічного секанса [9]:

$$\frac{1}{ch\sqrt{\frac{\pi}{2}}x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{e^{-ixy}}{ch\sqrt{\frac{\pi}{2}}y}. \quad (4.5)$$

Для перевірки цієї формули треба доповнити контур інтегрування півколом у верхній або нижній напівплощині комплексної змінної y в залежності від знаку x . Після обчислення лишків підінтегральної функції в нулях гіперболічного косинуса $y_n = i\sqrt{2\pi} \left(n + \frac{1}{2} \right)$ ($n = 0, \pm 1, \dots$) рівняння (4.5) підтверджується як справедливе. Використаємо (4.5) та представимо функцію розподілу Фермі-Дірака в вигляді інтегралу Фур'є:

$$f(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}(\varepsilon-\mu)}}{4ch\frac{\pi k}{2}}. \quad (4.6)$$

Тоді логарифм з (4.4) у випадку Фур'є перетворення має вигляд:

$$\ln[1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}] = \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}(\varepsilon-\mu)}}{2i(k-i)ch\frac{\pi k}{2}}. \quad (4.7)$$

Підставляємо (4.7) в (4.4) і отримуємо:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk Z(k) \frac{e^{i(k-i)\frac{\beta\mu}{2}}}{2i(k-i)ch\frac{\pi k}{2}},$$

де $Z(k) = \text{Spe}^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\hat{H}} = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \sum_{\sigma=-1}^1 e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\varepsilon(n_1, n_2, \sigma)}$.

Підставимо енергію (4.3) електрона в квантовій точці в вираз для $Z(k)$. В результаті отримуємо:

$$Z(k) = \frac{2e^{-i(k-i)\frac{1}{4}\beta\omega\hbar} ch \left[i(k-i)\frac{\beta}{2}\mu_B H \right]}{\left[1 - e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\hbar\omega_+} \right] \left[1 - e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\hbar\omega_-} \right]}.$$

Підставляючи це в великий потенціал Ω отримуємо:

$$\begin{aligned} \Omega &= -\frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}(\frac{\hbar\omega}{2}-\mu)}}{i(k-i)ch\frac{\pi k}{2}} \frac{ch \left[i(k-i)\frac{\beta}{2}\mu_B H \right]}{\left[1 - e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\hbar\omega_+} \right] \left[1 - e^{-i(k-i)\frac{\beta}{2}\hbar\omega_-} \right]} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \Omega(k). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Щоб обчислити інтеграл (4.8), потрібно скористатись теоремою Коші про лишки [7]. Функція $ch^{-1}\frac{\pi k}{2}$ має прості полюси в $k_n = i(2n+1)$ ($n = 0, \pm 1, \dots$). Точка $k = i$ це є полюс другого порядку функції $Z(k)$. Якщо частоти $\omega_{\pm}$ несумірні, то ця функція має прості полюси в точках :

$$k_n^{\pm} = i + \frac{4\pi n}{\beta \hbar \omega_{\pm}} \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Якщо навпаки, то точки $k^{\pm}$ є полюсами другого порядку функції $Z(k)$.

Якщо виконана нерівність $\mu \leq \frac{\hbar \omega}{2} - \mu_B H$, відповідно до леми Жордана контур інтегрування (4.8) можна доповнити півколом у нижній напівплощині k . Усередені контуру розташовані прості полюси гіперболічного секанса в $k_n = i(2n + 1)$ ($n = -1, -2, \dots$). Використовуючи теорему Коші, отримуємо:

$$\Omega = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{e^{\beta \mu n} \operatorname{ch}(\beta \mu_B H n)}{\operatorname{sh}\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_+ n\right) \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_- n\right)}.$$

Якщо виконана нерівність $\mu \geq \frac{\hbar \omega}{2} - \mu_B H$, контур інтегрування (4.8) потрібно замкнути у верхній напівплощині. У середині контура розташований полюс четвертого порядку в точці $k = i$, прості полюси в $k_n = i(2n + 1)$ ($n = 1, 2, \dots$) та полюси в:

$$k_n^{\pm} = i + \frac{4\pi n}{\beta \hbar \omega_{\pm}} \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots),$$

Обмежимося випадком при несумірних частотах $\omega_{\pm}$.

Щоб обчислити лишки для полюсу четвертого порядку $k = i$, представимо підінтегральний вираз Ω в (4.8) поблизу полюса рядом Лорана:

$$\Omega(k) = \sum_{p=-4}^{\infty} a_p (k - i)^p.$$

Тоді лишок має наступний вигляд:

$$\operatorname{res}_{k=i} \Omega(k) = a_{-1} = \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{\mu \omega_c^2}{12 \omega_0^2} - \mu \left(\frac{\mu_B H}{\hbar \omega_0} \right)^2 - \frac{1}{3} \frac{\mu^3}{\hbar^2 \omega_0^2} - \frac{\pi^2 \mu}{3(\beta \hbar \omega_0)^2} + \frac{\mu}{6} \right].$$

Внесок простих полюсів в $k_n = i(2n + 1)$ ($n = 1, 2, \dots$) у потенціал Ω :

$$\Omega_1 = \frac{1}{2\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{e^{-\beta \mu n} \operatorname{ch}(\beta \mu_B H n)}{\operatorname{sh}\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_+ n\right) \operatorname{sh}\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_- n\right)}. \quad (4.9)$$

При низьких температурах $\beta^{-1} \ll \mu$ цей вираз малий.

Внесок полюсів в $k_n^{\pm}$ може бути представлений в наступному вигляді:

$$\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega}_+ + \tilde{\Omega}_-,$$

де

$$\tilde{\Omega}_{\pm} = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{\sin\left(2\pi n \frac{\mu}{\hbar \omega_{\pm}}\right) \cos\left(2\pi n \frac{\mu_B H}{\hbar \omega_{\pm}}\right)}{\sin\left(\pi n \frac{\omega_{\pm}}{\omega_{\pm}}\right) \operatorname{sh} \frac{2\pi^2 n}{\beta \hbar \omega_{\pm}}}. \quad (4.10)$$

Це рівняння знає де гааз-ванальфенівських осциляцій термодинамічного потенціалу.

Одержано рівняння для термодинамічного потенціалу квантової точки з гамільтоніаном (4.1):

$$\Omega = \Omega_L + \Omega_P + \Omega_1 + \Omega_2 + \tilde{\Omega}$$

де

$$\Omega_L = \frac{\mu}{12} \left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right)^2 = -\frac{1}{2} \chi_L H^2$$

– внесок у діамagnetизм Ландау,

$$\chi_L = -\frac{2}{3} \mu \left(\frac{\mu_B}{\hbar \omega_0}\right)^2$$

– сприйнятливість Ландау;

$$\Omega_P = -\mu \left(\frac{\mu_B H}{\hbar \omega_0}\right)^2 = -\frac{1}{2} \chi_P H^2$$

– внесок у парамагнетизм Паулі,

$$\chi_P = 3|\chi_L|$$

– сприйнятливність Паулі;

$$\Omega_2 = -\frac{\mu}{3} \left[\left(\frac{\mu}{\hbar\omega_0} \right)^2 + \pi^2 \left(\frac{1}{\hbar\beta\omega_0} \right)^2 - \frac{1}{2} \right]$$

– внесок який не залежить від магнітного поля; Ω_1 і $\tilde{\Omega}$ дорівнюють відповідно (4.9) і (4.10).

Якщо виконана нерівність $\mu \geq \frac{\hbar\omega}{2} - \mu_B H$, то магнітний момент квантової точки буде дорівнювати:

$$M = M_L + M_P + M_1 + \tilde{M},$$

де

$$M_L = \chi_L H, M_P = \chi_P H,$$

$$M_1 = -\frac{\mu_B}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{e^{-\beta\mu n}}{\text{sh}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_+ n\right) \text{sh}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_- n\right)} \left\{ \text{sh}(\beta\mu_B H n) - \frac{1}{\omega} \text{ch}(\beta\mu_B H n) \left[\omega_+ \text{cth}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_+ n\right) - \omega_- \text{cth}\left(\frac{1}{2}\beta\hbar\omega_- n\right) \right] \right\},$$

$$\tilde{M} = \tilde{M}_+ + \tilde{M}_-,$$

$$\tilde{M}_{\pm} = -\frac{\partial \tilde{\Omega}_{\pm}}{\partial H} =$$

$$\begin{aligned} &= \frac{4\pi\mu_B}{\beta\hbar\omega} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\sin\left(2\pi n \frac{\mu}{\hbar\omega_{\pm}}\right)}{\sin\left(\pi n \frac{\omega_{\mp}}{\omega_{\pm}}\right) \text{sh}\left(\frac{2\pi^2 n}{\beta\hbar\omega_{\pm}}\right)} \left[\pm \frac{\mu}{\hbar\omega_{\pm}} \text{ctg}\left(2\pi n \frac{\mu}{\hbar\omega_{\pm}}\right) \cos\left(2\pi n \frac{\mu_B H}{\hbar\omega_{\pm}}\right) \right. \\ &\quad \mp \frac{\omega_{\mp}}{\omega_{\pm}} \text{ctg}\left(\pi n \frac{\omega_{\mp}}{\omega_{\pm}}\right) \cos\left(2\pi n \frac{\mu_B H}{\hbar\omega_{\pm}}\right) \mp \frac{\pi}{\beta\hbar\omega_{\pm}} \cos\left(2\pi n \frac{\mu_B}{\hbar\omega_{\pm}}\right) \text{cth}\left(\frac{2\pi^2 n}{\beta\hbar\omega_{\pm}}\right) \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\omega}{\omega_{\pm}} \sin\left(2\pi n \frac{\mu_B}{\hbar\omega_{\pm}}\right) \left(1 \mp \frac{2\mu_B H}{\hbar\omega}\right) \right]. \end{aligned}$$

Середнє число електронів у квантовій точці дорівнює:

$$\begin{aligned}
N = & -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = -\frac{1}{12} \left(\frac{\omega_c}{\omega_0} \right)^2 + \left(\frac{\mu_B H}{\hbar \omega_0} \right)^2 + \left(\frac{\mu}{\hbar \omega_0} \right)^2 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{1}{\beta \hbar \omega_0} \right)^2 - \frac{1}{6} \\
& + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n e^{-\beta \mu n} \frac{ch(\beta \mu_B H n)}{sh\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_+ n\right) sh\left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega_- n\right)} \\
& - \frac{2\pi}{\hbar \beta} \sum_{\pm} \frac{1}{\omega_{\pm}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\cos\left(2\pi n \frac{\mu}{\hbar \omega_{\pm}}\right) \cos\left(2\pi n \frac{\mu_B H}{\hbar \omega_{\pm}}\right)}{\sin\left(\pi n \frac{\omega_{\pm}}{\omega_0}\right) sh\left(\frac{2\pi^2 n}{\beta \hbar \omega_{\pm}}\right)}.
\end{aligned}$$

де $\sum_{\pm}$ означає суму внесків з частотами $\omega_{\pm}$. При фіксованому числу електронів в системі це рівняння дозволяє визначити як залежить їх хімічний потенціал від температури та напруженості магнітного поля.

4.2. Магнетизм в різних режимах температур та магнітного поля

Через присутність двох частот $\omega_{\pm}$ на температурній осі можна виділити три ділянки: низькі температури $\beta \hbar \omega_- > 1$, проміжні температури $\hbar \omega_- < \beta^{-1} < \hbar \omega_+$, високі температури $\beta \hbar \omega_+ < 1$. Щоб проаналізувати намагніченість на цих ділянках можна використати декартові координати $\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}, \frac{1}{\beta \hbar \omega_0}\right)$ на площині. Криві $\beta^{-1} = \hbar \omega_{\pm}$ розділяють площину на три частини.

В області, що розташована нижче ніж крива $\beta^{-1} = \hbar \omega_-$, основний внесок в намагніченість дають M_L, M_P і $\tilde{M}$. Виділимо область сильних ($\omega_- \gg \omega_0$) і слабких ($\omega_- \ll \omega_0$) магнітних полів. Область сильних полів:

$$\omega_+ \approx \omega_c, \omega_- \approx \frac{\omega_0^2}{\omega_c}, \frac{\omega_+}{\omega_-} \approx \left(\frac{\omega_c}{\omega_0}\right)^2.$$

Маємо в результаті для магнітного моменту:

$$M \approx M_L + M_P + \tilde{M}_+.$$

Це значить що намагніченість зазнає осциляцій де Гааза-ван Альфена.

У випадку слабого поля маємо:

$$\omega_{\pm} \approx \omega_0 \left(1 \pm \frac{\omega_c}{2\omega_0} \right), \frac{\omega_{\pm}}{\omega_{\mp}} \approx 1 \pm \frac{\omega_c}{\omega_0}.$$

Внески $\tilde{M}_+$ та $\tilde{M}_-$ однакового порядку. Також має місце:

$$\sin \pi \frac{\omega_{\mp}}{\omega_{\pm}} \approx \mp (-1)^n \sin \pi n \frac{\omega_c}{\omega_0}.$$

Під час зміни магнітного поля цей множник зазнає флуктуації. Їх називають мезоскопічними. Якщо збільшувати поле, вони будуть накладатися на осциляції де Гааза-ван Альфена.

Поблизу точки (0,1) на площині $\left(\frac{\omega_c}{\omega_0}, \frac{1}{\beta \hbar \omega_0} \right)$, основними внесками в намагніченість будуть діамagnetизм Ландау та парамагнетизм Паулі. В сильному полі має місце наступний вираз:

$$\frac{\omega_c}{\omega_0} > \left| \beta \hbar \omega_0 - \frac{1}{\beta \hbar \omega_0} \right|.$$

Тому маємо $M \approx M_L + M_P + \tilde{M}_+$ - відбуваються осциляції де Гааза-ван Альфена.

Якщо температури досить високі, осцилюючою частиною намагніченості можна знехтувати. В цій області домінують діамagnetизм Ландау та парамагнетизм Паулі електронного газу.

ВИСНОВОК

Була виконана поставлена мета дипломної роботи, а саме обчислення термодинамічних функцій двовимірного електронного газу обмеженого утримуючим потенціалом в магнітному полі, розгляд проявів орбітального та спінового магнетизму в різних режимах температур і магнітного поля. Результати отримані в роботі в подальшому будуть корисними для обчислення властивостей квантових точок з впровадженими до них домішковими атомами.

Основні результати роботи такі:

1. Шляхом розв'язання стаціонарного рівняння Шредінгера розраховані великий енергетичний спектр та хвильову функцію квантової точки, термодинамічний потенціал, магнітний момент системи, середнє число електронів.
2. Розраховано термодинамічний потенціал, магнітний момент системи, середнє число електронів.
3. Розглянуто прояви магнетизму в різних режимах температур і магнітного поля. В випадку сильних полів намагніченість зазнає осциляцій де Гааза-ван Альфена. У випадку слабкого поля будуть відбуватися мезоскопічні флуктуації, якщо збільшувати поле вони будуть накладатися на осциляції де Гааза-ван Альфена. При досить високих температурах осцилюючою частиною можна знехтувати. В цій області домінують діамagnetизм Ландау та парамагнетизм Паулі електронного газу.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Chakraborty, T., 1999, Quantum Dots: A Survey of the Properties of Artificial Atoms (North-Holland, Amsterdam).
2. S. M. Reimann and M. Manninen: Electronic structure of quantum dots
3. Fock, V., 1928, Z. Phys. 47, 446.
4. Darwin, C. G., 1930, Proc. Cambridge Philos. Soc. 27, 86.
5. Bimberg, D., M. Grundmann, and N. N. Ledentsov, 1999, Quantum Dot Heterostructures (Wiley, Chichester/NewYork).
6. Landau, Lev D.; Lifshitz, Evgeny M. (1977). Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory. Vol. 3 (3rd ed.).
7. George B. Arfken Mathematical methods for physicists sixth edition
8. Градштейн И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – М.: Наука, 1971. – 1108 с.
9. J. P. Gazeau, P. Y. Hsiao, and A. Jellal, Phys. Rev. B 65, № 9, 094427 (2002).
10. Landau, Lev D.; Lifshitz, Evgeny M. (1980). Statistical Physics. Vol. 5 (3rd ed.)
11. E. Lipparini – Modern Many-Particle Physics Atomic Gases, Quantum Dots and Quantum Fluids
12. Квантова механіка : підручник / І. О. Вакарчук. 4-те вид., доп. Львів : ЛНУ імені Івана Франка, 2012. 872 с.: 78 іл.