УДК 538.915

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА КВАНТОВОЙ ТОЧКИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ: МАГИЧЕСКИЕ ЧИСЛА, КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА, ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК, ВИГНЕРОВСКАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ¹

Васильченко А.А.², Яковенко Н.А.³

ELECTRONIC STRUCTURE OF A QUANTUM DOT IN THE MAGNETIC FIELD: MAGIC NUMBERS, QUANTUM HALL EFFECT, METAL-INSULATOR TRANSITION, WIGNER CRYSTALLIZATION

Vasilchenko A. A., Yakovenko N. A.

The system of the Kohn-Sham equations for two-dimensional electrons in the quantum dot with a large number of electrons (up to 140 electrons) is numerically solved. New series of magic numbers for the complete angular moment of electrons in the quantum dot in the high magnetic field are found. For low average density of electrons, it has been shown that two electrons are localized on an impurity and the electron density has peaks and troughs with a period $\approx \pi L$.

Введение

Структуры с квантовыми точками (KT) являются перспективным материалом современной наноэлектроники, поэтому в настоящее время проводятся интенсивные исследования электронных, оптических и транспортных свойств квантовых точек и их ансамблей. В КТ носители заряда локализованы в области с размерами от единиц до нескольких десятков или сотен нанометров, следствием чего их энергетический спектр является дискретным. Изучение электронной структуры КТ важно как для фундаментальных исследований (вигнеровская кристаллизация, квантовый эффект Холла, переход металлдиэлектрик), так и для практического применения (лазеры, одноэлектронные транзисторы, элементы памяти).

Известно, что кулоновское взаимодействие электронов в КТ играет существенную роль, поэтому представляет интерес расчет электронной плотности и уровней энергии электронов в КТ с учетом межэлектронного взаимодействия, а также характер изменения плотности заряда под действием внешнего возмущения.

Результаты численного решения [1–5] многочастичного уравнения Шредингера для числа электронов N<10 показали, что энергетический спектр электронов имеет некоторые особенности. В частности, основное и метастабильные состояния многоэлектронной системы в магнитном поле наблюдаются только при определенных значениях полного углового момента электронов $\hbar M$. Эти значения полного углового момента названы магическими числами (МЧ). В [2] установлено, что МЧ имеют период $\Delta M = N$. В дальнейшем [6, 7] была найдена новая серия МЧ с периодом $\Delta M = N - 1$. Точные вычисления показали [4] что, по крайней мере, при факторе заполнения уровня Ландау $\nu < 0, 4$, электроны кристаллизуются и образуют вигнеровскую молекулу. Если основное состояние электронной системы соответствует МЧ с периодом $\Delta M = N - 1$, то электроны имеют полигональную конфигурацию, при которой один электрон находится в центре.

В настоящее время одним из самых мощных методов учета многочастичного взаимодействия является теория функционала плотности (ТФП). В данной работе исследуются электронные свойства двумерных кванто-

¹Работа выполнена при поддержке РФФИ юг и администрации Краснодарского края (06-02-96640).

²Васильченко Александр Анатольевич, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры оптоэлектроники Кубанского государственного университета; доцент кафедры компьютерных технологий и информационной безопасности Кубанского технологического университета.

³Яковенко Николай Андреевич, д-р тех. наук, зав. кафедрой оптоэлектроники, декан физико-технического факультета Кубанского государственного университета.

вых точек в перпендикулярном магнитном поле с помощью ТФП. Ожидается, что подобные системы в будущем найдут ряд практических применений, таких как логические наноустройства и переключатели.

1. Метод расчета

В дальнейшем будем использовать атомную систему единиц, в которой энергия выражается в единицах $Ry = \frac{e^2}{2ka}$, а длина в $-a = \frac{k\hbar^2}{m^*e^2}$, где $m^* - эффективная масса электрона, <math>k - диэлектрическая$ проницаемость. Все вычисления будем проводить для КТ на основе GaAs, для которого k = 12, 4 и $m^* = 0,067$ me (me — масса свободного электрона).

Согласно ТФП полная энергия многоэлектронной системы во внешнем потенциале $V_{ext}(r)$ является однозначным функционалом плотности электронов n(r)

$$E\left[n^{\uparrow}, n^{\downarrow}\right] = T\left[n\right] + E_{ext}\left[n\right] + E_{H}\left[n\right] + E_{Z}\left[n^{\uparrow}, n^{\downarrow}\right] + E_{xc}\left[n^{\uparrow}, n^{\downarrow}\right], \quad (1.1)$$

где $n(r) = n^{\uparrow}(r) + n^{\downarrow}(r)$, $n^{\sigma}(r)$ — плотность электронов с данным направлением спина $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$, $\mathbf{r} = (x, y)$, T[n] — кинетическая энергия невзаимодействующих электронов в магнитном поле напряженности B, которое задается векторным потенциалом $\mathbf{A} = B(-y/2, x/2, 0).$

Второй член в уравнении (1.1) связан с внешним взаимодействием и задается выражением

$$E_{ext}[n] = \int V_{ext}(r)n(r)dr, \qquad (1.2)$$

где

$$V_{ext}(r) = 2 \int_{0}^{R} \frac{n_{+}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dr' - \frac{2z_{0}}{r}.$$
 (1.3)

Внешний потенциал $V_{ext}(r)$ создаётся примесью с зарядом z_0 и положительно заряженным фоном плотности n_+ . Для квантовой точки с N электронами величина R находится из условия электронейтральности $n_+\pi R^2 = N$. Во многих работах удерживающий потенциал от положительно заряженного фона первый член в формуле (1.3) заменяется параболическим потенциалом, равным $V(r) = \frac{\omega_0^2}{4} \rho^2$. Действительно, при малых r первый член в (1.3) имеет квадратичную зависимость от r, при этом

$$\omega_0 = \frac{2(\pi n_+)^{3/4}}{N^{1/4}}.$$
 (1.4)

Выражение для кулоновской энергии имеет следующий вид:

$$E_H[n] = \int V_H(r)n(r)dr, \qquad (1.5)$$

где

$$V_H(r) = 2 \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dr'.$$
(1.6)

Четвертый член в выражении (1.1) определяет зеемановскую энергию

$$E_{Zt}\left[n^{\uparrow}, n^{\downarrow}\right] = \frac{1}{2}g\mu_{B}B\int\left[n^{\uparrow}(r) - n^{\downarrow}(r)\right]dr, \quad (1.7)$$

где *g* — фактор Ланде.

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

$$E_x [n^{\sigma}] = \int \varepsilon_x (n^{\sigma}) dr - \sum_m \int \left(\varepsilon_x (n_m^{\sigma}) + \frac{1}{2} V_{H,m}(r) \right) n_m^{\sigma}(r) dr,$$
(1.8)

где $\varepsilon_x(n^{\sigma})$ — обменная энергия на один электрон для однородного электронного газа, которая для нижнего уровня Ландау имеет вид

$$\varepsilon_x \left(n^{\sigma} \right) = -\sqrt{\frac{\pi}{8}} 4\pi L n^{\sigma}(r), \qquad (1.9)$$

здесь L — магнитная длина, $n_m^{\sigma}(r)$ — плотность m-го электрона со спином σ .

Следует остановиться подробнее на формуле (1.8). В ПЛП компенсация самодействия электронов обменной и кулоновской энергии оказывается неполной. Когда число электронов конечно и мало, необходимо исключить самодействие электронов в обменной и кулоновской энергии раздельно, что и сделано в выражении (1.8).

Для GaAs величина g-фактора мала (g = -0, 44), поэтому вклад в ролную энергию зеемановской энергии значительно меньше, чем кулоновской и кинетической, поэтому



Рис. 1. Зависимость энергии от суммарного углового момента всех электронов (N = 7, B = 18,8 Тл, $\hbar\omega_0 = 3$ мэВ): \blacksquare — точный результат [5], \bigcirc — ТФП. Энергия отсчитывается от величины $(\omega_0^2 + 1/L^4)^{1/2}$. Точки соединены линиями для наглядности

в выражении (1.1) величиной E_Z можно пренебречь.

Вычисления проводились для магнитных полей, при которых занят только нижний уровень Ландау. Варьируя энергию (1.1) и учитывая круговую симметрию, получаем уравнения Кона-Шэма

$$\begin{cases} -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{r^2}{4L^4} + \frac{m^2}{r^2} - \\ -\frac{m}{L^2} + V_{eff}^{\sigma}(r) \end{cases} \psi_m^{\sigma}(r) = E_m \psi_m^{\sigma}(r) \quad (1.10) \end{cases}$$

с эффективным одночастичным потенциалом

$$V_{eff}^{\sigma}(r) = V_{H}(r) - V_{H,m}(r) + + 2\alpha \left(n^{\sigma}(r) - n_{m}^{\sigma}(r) \right) + V_{ext}(r), \quad (1.11)$$

где *m* — угловой момент электрона,

$$n_m(r) = |\psi_m^{\sigma}(r)|^2, \quad n^{\sigma}(r) = \sum_{occ_m} n_m^{\sigma}(r),$$
$$\alpha = -\sqrt{\frac{\pi}{8}} 4\pi L.$$

2. Результаты и их обсуждение

Нелинейная система уравнений Кона-Шэма решались численно, используя метод итераций. Проведено сравнение полученных с использованием ТФП результатов с точными [3,4]. Различие между ними составило менее 5%. Были получены те же магические числа, как и в точных вычислениях. На рис. 1 результаты расчетов сопоставляются с данными [4]. Видно, что величина энергии, вычисленная с помощью ТФП, приблизительно на 13% больше точной величины, а положения минимумов энергии совпадают. Отметим, что учет корреляционной энергии уменьшает полную энергию в ТФП.

При увеличении числа частиц N появились новые серии магических чисел (рис. 2), а именно: {103, 115, 127, 139} (соответствуют периоду $\Delta M = N - 2$), {113, 124, 135} ($\Delta M = N - 3$), {111, 121, 131} ($\Delta M = N - 4$), (109)($\Delta M = N - 5$). Период $\Delta M = N - k$ означает, что k электронов имею компактную конфигурацию (0, 1, ..., k - 1) как в пространстве углового момента, так и в обычном пространстве.

Основное состояние в случае $z_0=0$ для параметров, указанных на рис. 2, наблюдается при М = 124. В этом случае три электрона локализованы в центре КТ, а остальные распределены по кольцу. С повышением напряженности магнитного поля основным станет состояние с М = 127, которое имеет два электрона в центре КТ. Разность энергий (щель) между этими состояниями составляет около одного градуса Кельвина. Из рис. 2 видно также, что введение положительно заряженной примеси изменяет набор магических чисел. Исчезают локальные минимумы при М = 105, 109, 121, 134, а основное состояние сдвигается в сторону меньшего полного углового момента. Таким образом, можно сделать вывод, что примеси сильно влияют на электронную структуру КТ. Возможно, подобное влияние и приводит к исчезновению дробного квантово-



Рис. 2. Зависимость полной энергии электронов от суммарного углового момента всех электронов $(N = 14, B = 4 \text{ Tл}, \hbar\omega_0 = 2 \text{ мэВ}).$ $\blacksquare - z_0 = 0; \bigcirc - z_0 = 1.$ Точки соединены линиями для наглядности

го эффекта Холла в «грязных» полупроводниках.

Были проведены расчеты для неполяризованных электронов, находящихся на нижнем уровне Ландау. Рассчитывалась область магнитных полей, в которой электроны имеют компактную конфигурацию $(0, 1, \ldots, N-1)$. Для этого исследовался переход от компактной конфигурации к неполяризованному состоянию, а именно $(0, 1, ..., N-1) \rightarrow (0, 1, ..., N-1)$ $\dots, N-2, L$), где L — угловой момент электрона со спином, противоположным к спинам остальных электронов. Значение L определялась из минимума энергии. Этот переход на рис. 3 обозначен кривой B_1 . Кривая B_2 на рис. З показывает структурный переход (0, 1, $\dots, N-1$) \rightarrow (1, 2, \dots, N), который близок к переходу от состояния с фактором заполнения уровня Ландау $\nu = 1$ к состоянию с $\nu < 1$. При увеличении числа электронов N область существования компактной конфигурации сужается, и следует ожидать, что с увеличением числа электронов ширина плато в целочисленном квантовом эффекте Холла будет уменьшаться. Для бесконечной системы с примесями можно предположить, что примеси способствуют разбиению двумерного электронного газа на области с небольшим числом электронов и таким образом ширина плато будет больше, чем в «чистых» образцах.

В квантовой точке в сильном магнитном поле отношение кулоновской энергии взаимодействия двух электронов 2/L к их кинетической энергии $2/L^2$ равно L. В случае $L \gg 1$ будет преобладать кулоновское взаимодействие и в этом случае следует ожидать непостоянной плотности электронов. Были выполнены расчеты для случая L > 1 и $z_0 = 1$. Связь между напряженностью магнитного поля B и частотой удерживающего потенциала ω_0 выбиралась согласно формуле (1.4), причем $n_+ = \frac{1}{2\pi L^2}$.

Результаты вычислений показаны на рис. 4. Видно, что при понижении напряженности магнитного поля амплитуда осцилляций электронной плотности растет, а пики и впадины не меняют своего положения и имеют период $\approx \pi L$.

При напряженности магнитного поля ниже некоторой величины (экстраполяция представленных на рис. 4 результатов дает B < 2,2 Тл) электронная плотность в первом минимуме падает до нуля и волновые функции электронов с m = 0 и m = 1 практически не перекрываются с волновыми функциями других электронов. В этом случае эти электроны не будут участвовать в проводимости. Полученный результат показывает, что электроны могут локализоваться на примеси и не вносить вклад в проводимость только при низких магнитных полях (низких плотностях двумерного электронного газа) или при высоких плотностях примесей. При локализации двух электронов на примеси [8, 9] переход металл-диэлектрик [10] будет наблюдаться в двумерном слое с двумерной концентрацией примесей N_i в два раза ниже, чем концентрация электронов N_e. Таким образом, при факторе заполнения $\nu = 1$ переход металл-диэлектрик будет происходить при отношении $N_i/N_e = 0.5$, универсально для всех полупроводников. Экспериментальные данные [11], полученные для кремния, да-



Рис. 3. Фазовая диаграмма перехода от спин-поляризованного состояния электронов с компактной конфигурацией в неполяризованное состояние (кривая B_1) и в состояние с фактором заполнения уровня Ландау $\nu < 1$ (кривая B_2), $\omega_0 = 9,76/N^{1/4}$

ют $N_i/N_e^c = 0,43$, что хорошо согласуется с результатами проведенных вычислений.

В настоящее время широко изучается вигнеровская кристаллизация в двухмерных системах в сильном магнитном поле. В двумерных системах без магнитного поля вигнеровский кристалл может образоваться только при низких плотностях. Магнитное поле подавляет кинетическую энергию электронов и способствует кристаллизации.

Рассмотрим систему N электронов, удерживаемых в конечной области двумерного электронного газа. Разобьём плоскость двумерного газа на нейтральные ячейки с граничными условиями такими, что $S/2\pi L^2 = q$, где $S = \pi \rho_c^2$, ρ_c — радиус ячейки, q — целое число (число одноэлектронных состояний в ячейке). Для изолированной ячейки уравнения Кона– Шэма имеют вид (1.10), (1.11) с удерживающим потенциалом, который создаётся положительно заряженным фоном с плотностью n_+ .

Самосогласованные результаты расчётов приведены в табл. 1, где величина ε — средняя энергия на один электрон, ε_1 — энергия электронов с угловым моментом m = 0, ε_2 — средняя энергия на один электрон для электронов с угловым моментом $m \neq 0$. Здесь под фактором заполнения уровня Ландау понимается величина $\nu = n_+ 2\pi L^2$.

Результаты, представленные в табл. 1 и на рис. 5, показывают, что ε_1 и ε_2 слабо зависят от числа электронов N, то есть для данных параметров приближение невзаимодействующих ячеек оправдано. В этом случае система ячеек с одним электроном имеет меньшую энергию, чем однородный электронный газ. Для бесконечной системы, учитывая граничные условия, видно, что в точке $\nu = 1/7$ 2МЭГ разбивается только на ячейки с одним электроном (локализованное состояние), а вблизи $\nu = 1/7$ будут существовать как локализованные состояния, так и протяженные ($m \neq 0$) состояния. Отметим, что аналогичные результаты получены и для $\nu = 1/5$. Для $\nu = 1/q + \Delta \nu$ ($\Delta \nu \ll 1/q$) из граничного условия получаем $S_c n_+ = 1 + \Delta \nu q$. Так как в целом система электронейтральна, избыточный заряд $\Delta \nu q$ должен компенсироваться протяженными состояниями. На $n_c = 1/\Delta \nu q$ ячеек приходится один «протяженный» электрон, а полное число электронов, находящихся в протяженном состоянии, в системе с N электронами, будет равно $n_{ex} = N\Delta \nu q$.

Таким образом, в точке $\nu = 1/q$ получается излом в энергии, причём щель в спектре электронов имеет многочастичную природу. Для рождения одного «протяженого» электрона и уничтожения одной ячейки, требуется энергия $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$.

Плато в холловском сопротивлении при $\nu = 1/q$ имеет такую же природу, как и в целочисленном эффекте Холла. Однако энергетическая щель имеет другую природу, и, как показано выше, связана с возникновением вигнеровской кристаллизации или волны зарядовой плотности.

Полученный результат не противоречит теории композитных фермионов. Между фермионами существует сильное взаимодействие, что может привести к неоднородному эффективному магнитному полю В. Поэтому система электронов с $\nu = 1/7$ будет эквивалентна системе фермионов в пространственно модулированном эффективном магнитном поле.

При $\nu > 1/5$ приближение невзаимодействующих ячеек работает хуже и в этом слу-



Рис. 4. Профили плотности электронов в квантовой точке с N = 140 (сплошная линия -B = 2,6 Тл; штриховая линия -B = 3 Тл; пунктирная линия -B = 4 Тл)



Рис. 5. Профили плотности электронов в квантовой точке с различным числом электронов, $\nu=1/7,$ $n_+=10^{11}~{\rm cm}^{-2}$

Таблица 1. Полная энергия и средние энергии на один электрон для $\nu=1/7$ и $n_+=10^{11}~{\rm cm}^{-2}$

N	E_t	ε	ε_1	$arepsilon_2$
1	3,04	3,04	3,04	-
2	6,37	$3,\!19$	_	$3,\!19$
3	9,78	3,26	-	3,26
4	13,24	3,31	3,02	3,41
5	16,61	$3,\!32$	3,04	$3,\!39$
6	20,02	3,34	3,05	$3,\!39$
7	23,49	$3,\!36$	3,06	3,41
8	27,02	$3,\!38$	3,07	3,42

Таблица 2. Средняя энергия на один электро
н для изолированных квантовых точек с ${\cal N}$ электронами

В, Т	ν	N=1	N=2	N=3
28,8 20.7	$\frac{1/7}{1/5}$	$3,04 \\ 1.864$	$3,18 \\ 1.948$	$3,26 \\ 2,003$
12,4 $8,3$	1/3 1/2	$0,714 \\ 0,153$	0,686 0,070	$0,735 \\ 0,076$

чае вычисления значительно усложнятся. Тем не менее, были проведены вычисления для изолированных ячеек с 1, 2 и 3 электронами при различных магнитных полях и результаты этих вычислений экстраполированы на бесконечную систему. Как видно из табл. 2, при $\nu \approx 0,3$ энергия на один электрон для квантовой точки с двумя электронами становится меньше чем энергия квантовой точки с одним электроном. При $\nu \approx 0,5$ энергия на один электрон будет минимальной для квантовой точки с тремя электронами.

Для бесконечной системы в области $0,3 \leqslant \nu \leqslant 0,5$ энергетически выгодно будет иметь ячейки с двумя электронами, а при $\nu \ge 0,5$ — с тремя электронами. Как было указано ранее, в последней области *v* приближение невзаимодействующих ячеек неоправданно и необходимо проведение более сложных вычислений. Как показывают оценки, в области $\nu > 1/5$ образуется волна зарядовой плотности. Тем не менее в этой области при факторах заполнения $\nu = p/q$ (p – целое число, равное числу электронов в ячейке) возникает щель, имеющая такую же природу как и при $\nu = 1/7$. Таким образом, при $\nu < 0,3$ щель возникает только в точках $\nu = 1/q$, при $0, 3 < \nu < 0, 5$ точках $\nu = 2/q$ и так далее. Такая зависимость подтверждается результатами экспериментов, в которых наблюдается дробное квантование холловского сопротивления при факторах заполнения $\nu = p/q$ с числителем р увеличивающимся по мере приближения ν к единице.

Для бесконечной системы, следует ожидать два структурных перехода: в точке $\nu \approx 0,3$ и в точке $\nu \approx 0,5$. При уменьшении магнитного поля могут появиться новые структурные переходы, связанные с увеличением числа электронов в ячейке. Кроме этого, для ячеек с $N \ge 2$ возможны и другие структурные переходы, связанные с изменением полного углового момента электронов, а значит, и с изменением профиля плотности электронов.

Литература

- Reimann S. M., Manninen M. Elctronic structure of quantum dots // Rev. Mod. Phys. 2002. Vol. 74. P. 1283–1342.
- Maksym P.A., Chakraborty T. Quantum dots in a magnetic fields: Role of electron-electron interactions // Phys. Rev. Lett. 1990. Vol. 65. P. 108–111.
- Maksym P. A. Magic number ground states of quantum dots in a magnetics field // Physica B. 1993. Vol. 184. P. 385–393.
- Yannouleas C., Landman U. Structural properties of electrons in quantum dots in high magnetic fields: Crystalline character of cusp states and excitation spectra // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. P. 235319–235327.
- Koskinen M., Manninen M., Mottelson B., Reimann S. M. Rotational and vibrational spectra of quantum rings // Phys. Rev. B. 2001. Vol. B63. P. 205323–205327..
- Seki T., Kuramoto Y., Nishino T. Origin of Magic Angular Momentum in a quantum Dot under Strong Magnetic Field // Journal of Phys. Soc. of Japan. 1996. Vol. 65. P. 3945–3951.
- March N. H., Vasilchenko A. A., Yakovenko N. A. Wigner crystallization of 2D electron gas in a strong magnetic field // Proceedings of 12 Int. Winter School on semiconductor Physics, Ekateriburg. 1997. P. 6–7.
- 8. Vasilchenko A. A. Non-linear screening of a charge impurity by two-dimensional electrons in a magnetic field // Proceedings of Int. Conf. on Electron Localization and Quantum Transport in Solids, Jaszowiec. 1996. P. 87.
- 9. Васильченко А.А. Переход металлдиэлектрик в структурах с двумерным электронным газом и примесями в сильном магнитном поле // Научная сессия МИФИ. 2006. М.: МИФИ, Т. 4. С. 148–150.
- Kravchenko S. V., Sarachik M. P. Metalinsulator transition in two-dimensional electron systems // Rep. Prog. Phys. 2004. Vol. 67. P. 1-44.
- Пудалов В. М., Д'Иорио М., Кэмпбелл Дэс. Hall resistance and quantized Hall effect to insulator transitions in a 2D electron system // Письма ЖЭТФ. 1993. Т. 57. Р. 592–595.

Статья поступила 13 мая 2007 г.

Кубанский государственный технологический университет, г. Краснодар

Кубанский государственный университет, г. Краснодар

[©] Васильченко А. А., Яковенко Н. А., 2007