

Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко

Белорусский государственный университет, г. Минск, Беларусь

АНАЛИЗ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ ВО ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Аннотация. Проведено численное моделирование электронной структуры квантовой точки, индуцированной электрическим полем наноразмерного дискообразного затвора и находящейся во внешнем магнитном поле. С помощью метода конечных элементов рассчитаны зависимости энергетического спектра электрона от величины магнитного поля и потенциала на затворе. Обнаружено наличие последовательности точек квазипересечения электронных уровней при относительно слабых магнитных полях, а также существование групп близких уровней энергии (электронных оболочек). Показано, что, несмотря на существенное отличие потенциала затвора от параболического потенциала, для качественного описания электронной структуры электрически индуцированной квантовой точки возможно использование модели приповерхностного анизотропного гармонического осциллятора. На основании этой модели описаны закономерности эволюции структуры волновых функций при изменении потенциала затвора и магнитного поля. В частности, модель анизотропного осциллятора позволяет предсказать появление точек квазипересечения электронных уровней при изменении внешних полей, а также квазивырождение состояний с различными значениями проекции орбитального момента импульса.

Ключевые слова: квантовая точка, численное моделирование, энергетический спектр, квазипересечение, анизотропный гармонический осциллятор

Для цитирования. Левчук, Е. А. Анализ электронной структуры электрически индуцированной квантовой точки во внешнем магнитном поле / Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 87–98.

E. A. Levchuk, L. F. Makarenko

Belarusian State University, Minsk, Belarus

ANALYSIS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF AN ELECTRICALLY INDUCED QUANTUM DOT IN THE EXTERNAL MAGNETIC FIELD

Abstract. Numerical modeling of the electronic structure of a quantum dot, induced by an electric field of a nanosized disc-shaped gate, is carried out in the presence of external magnetic field. The dependences of an electronic energy spectrum on electric and magnetic fields are calculated using the finite element method. It has been found that a series of anti-crossing points for electronic levels takes place at relatively small magnetic fields. The existence of groups of close-energy levels (electronic shells) has been found. It has been shown that despite the essential distinction of the gate potential from the parabolic one, a model of a near-surface anisotropic harmonic oscillator can be effectively used for a qualitative description of the electronic structure of the electrically induced quantum dot. With the use of this model, the evolution of energy spectrum and wave function structure with magnetic and electric fields is described. In particular, the anisotropic oscillator model allows to predict anti-crossing points of electronic levels in external fields, as well as quasi-degeneracy of states having different values of the angular momentum projection.

Keywords: quantum dot, numerical modeling, energy spectrum, anti-crossing, anisotropic harmonic oscillator

For citation. Levchuk E. A., Makarenko L. F. Analysis of the electronic structure of an electrically induced quantum dot in the external magnetic field. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 87–98 (in Russian).

Введение. Полупроводниковая квантовая точка (КТ) – это область полупроводника, имеющая нанометровые размеры, где движение носителей заряда ограничено электрическими полями. Такие поля могут возникать либо в результате погружения в матрицу более широкозонного полупроводника полупроводниковых нанокристаллов с меньшей шириной запрещенной зоны, либо вследствие приложения внешнего электрического поля посредством наноразмерных электродов. Типичная длина волны де Бройля в полупроводниках составляет ~ 10 нм, и такое ограничение

движения носителей заряда приводит к возникновению дискретных уровней в интервале миллиэлектронвольт. В результате этого имеет место аналогия между энергетическими спектрами квантовых точек и атомами. Поэтому квантовые точки часто называют «искусственными атомами» [1]. Например, одним из проявлений такого сходства является экспериментальное обнаружение оболочечной структуры уровней энергии КТ [2, 3].

Квантовые точки могут использоваться в качестве элемента многих устройств, таких как фотодетекторы, лазеры, солнечные элементы [4], нанoeлектронные приборы [5]. Массивы КТ предлагаются в качестве одной из возможных систем для реализации квантового компьютера [6]. Целенаправленное использование КТ в различных устройствах предполагает знание их электронной структуры, поэтому появилось множество работ, посвященных теоретическому исследованию влияния геометрических параметров и внешних полей на энергетический спектр квантовых точек различной природы (см. обзоры [5, 7]).

При изучении энергетического спектра квантовых точек часто используют упрощенные модели, для которых возможно получить аналитические выражения, описывающие электронные волновые функции и соответствующие им значения энергии. Примерами таких моделей являются в первую очередь КТ с гармоническим ограничивающим потенциалом, как двумерные [8], так и трехмерные, с изотропным [9] и анизотропным потенциалом [10]. Аналитическое решение возможно также для кусочно-постоянного потенциала с бесконечно высокими стенками в случаях КТ относительно простой формы. К таким структурам относятся двумерные прямоугольные, круглые, эллиптические КТ [11], трехмерные, имеющие форму шара, прямоугольного параллелепипеда, сфероида (вытянутого и сплюснутого), а также в виде линзы с параболическими границами [11, 12] и др.

Управление электронными состояниями квантовых точек в некоторых устройствах осуществляется с помощью внешнего магнитного поля, которое также может использоваться как средство экспериментального исследования электронной структуры КТ. Наиболее детально изучен случай действия магнитного поля на системы с гармоническим потенциалом локализации [4, 8], когда решение может быть получено точно. Для более реалистичных моделей КТ применяются численные методы [13].

Во многих приложениях предполагается использование электрически индуцированных КТ, в которых потенциал локализации электрона создается с помощью наноразмерного затвора. В частности, такие квантовые точки возникают в одной из предложенных реализаций твердотельного спинового квантового компьютера [14] и одноатомного транзистора [15]. Для подобных систем аналитическое решение не может быть получено, поэтому при расчете электронных состояний в таких системах следует применять численные методы. Однако при применении численных методов возникают трудности с качественным описанием энергетической структуры электрически индуцированной КТ и предсказанием закономерностей ее изменения при приложении внешних полей. Выявление таких закономерностей имеет важное значение для проектирования приборов, действие которых основано на эффекте туннелирования электронов между квантовой точкой и близлежащим донором (одноатомный транзистор), а также на управлении переходами между соседними КТ с помощью микроволнового излучения [16].

Поскольку создаваемые на практике наноструктуры обладают очень широким многообразием форм и размеров и чрезвычайно трудно точно определить вид потенциала, ограничивающего движение в них заряженных частиц (электронов), нужны математические модели, позволяющие получать точные (или почти точные) решения. Тогда, сравнивая результаты эксперимента и модельного расчета, можно получить значения параметров модельного потенциала для конкретных структур и использовать их в дальнейшем.

В данной работе рассматривается применимость модели трехмерного анизотропного гармонического осциллятора для описания электронной структуры электрически индуцированной КТ, ограничивающий потенциал которой создается электрическим полем затвора в виде тонкого заряженного диска [17]. На основе этой модели представлена классификация возбужденных состояний КТ и описывается качественное изменение структуры волновых функций и уровней энергии при изменении магнитного поля и потенциала затвора.

1. Постановка задачи. Будем рассматривать электронные состояния в двух видах квантовых точек, обладающих цилиндрической симметрией. Первый вид – это КТ, потенциал локализации которой является анизотропным параболическим, а второй – электрически индуцированная КТ. Обе точки будем считать расположенными вблизи поверхности полупроводника в области $z > 0$. Диэлектрическую проницаемость полупроводника будем обозначать ϵ_s , а эффективную массу электрона – m^* . Будем предполагать, что в плоскости $z = 0$ находится слой диэлектрика, создающий бесконечно высокий потенциальный барьер и обеспечивающий равенство нулю волновой функции на плоскости XOY . Однородное магнитное поле B направлено вдоль оси OZ . В рамках приближения эффективной массы исследуемая система описывается стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции Ψ и энергии E , которое в безразмерной форме имеет вид

$$\left(-\nabla^2 - i\mu \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V} \right) \Psi = E\Psi, \quad z > 0, \tag{1}$$

$$\Psi|_{z=0} = 0; \quad \Psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty, \tag{2}$$

где (ρ, z, φ) – цилиндрические координаты, а в качестве параметров безразмеривания используется эффективный боровский радиус $a^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s\hbar^2 / m^*e^2$ для длины и эффективный Ридберг $Ry^* = m^*e^4 / 2\hbar^2\epsilon_s^2$ для энергий. В уравнении (1) μ – безразмерное значение магнитного поля, определяемое выражением

$$\mu = \frac{(a^*)^2}{\lambda_B^2} = \frac{B}{B_0}, \tag{3}$$

где магнитная длина определяется как $\lambda_B = (\hbar / Be)^{1/2}$, а характеристическое магнитное поле B_0 есть

$$B_0 = 2.35 \cdot 10^5 \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\epsilon_s^2} \text{ Тл.}$$

Величина μ связана с циклотронной частотой ω_c выражением $\mu = \hbar\omega_c / 2Ry^*$.

Оператор \hat{V} представляет собой потенциал локализации. Будем предполагать, что потенциал локализации \hat{V}_G электрически индуцированной КТ создается в результате приложения внешнего потенциала к дискообразному затвору, находящемуся на поверхности полупроводника. Поскольку, как показано в [18], заряды изображения не влияют на качественное поведение характеристик рассматриваемой системы, соответствующие им члены в уравнении (1) учитываться не будут.

2. Результаты численных расчетов. *Электронные состояния приповерхностной параболической КТ.* Вначале исследуем модельную задачу, когда электрон движется в полупространстве вблизи поверхности полупроводника в поле параболического потенциала. Такую трехмерную квантовую точку будем называть приповерхностной параболической КТ. Будем рассматривать анизотропный потенциал локализации вида $\hat{V}_H = k_\rho^2 \rho^2 / 4 + k_z^2 z^2 / 4$, где $k_\rho = \hbar\omega_\rho / Ry^*$, $k_z = \hbar\omega_z / Ry^*$, ω_ρ, ω_z – частоты соответствующих гармонических колебаний. Для такого потенциала уравнение (1) преобразуется к виду

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\mu \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \frac{k_\rho^2 \rho^2}{4} + \frac{k_z^2 z^2}{4} \right) \Psi = E\Psi, \quad z > 0. \tag{4}$$

Решение уравнения (4) с учетом граничного условия (2) представляется в виде

$$\Psi(\rho, z, \varphi) = \rho^{|m|} \exp\left(-\left(k_z z^2 + K\rho^2\right)/4\right) H_{n_z} \left(\sqrt{\frac{k_z}{2}} z\right) L_{n_\rho}^{|m|} \left(\frac{K\rho^2}{2}\right) e^{im\varphi}, \quad (5)$$

где H_{n_z} – полиномы Эрмита, $L_{n_\rho}^{|m|}$ – присоединенные полиномы Лагерра [19],

$$K = \sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}, \quad n_\rho = 0, 1, 2, \dots; \quad n_z = 1, 3, 5, \dots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Соответствующие значения энергии определяются выражением

$$E = K(2n_\rho + |m| + 1) + k_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right) + m\mu. \quad (6)$$

Как видно из формул (5)–(6), волновые функции и уровни энергии определяются тройкой квантовых чисел (n_ρ, n_z, m) , и в дальнейшем мы будем использовать их для обозначения состояний цилиндрически симметричной КТ наряду с нумерацией уровней в порядке возрастания энергии E .

Из формулы (5) следует, что нодальными поверхностями (т. е. поверхностями, на которых волновая функция обращается в нуль) являются поверхности цилиндров, образующие которых параллельны оси OZ , и плоскости, перпендикулярные оси OZ . Количество нодальных цилиндров определяется числом положительных корней функции $L_{n_\rho}^{|m|}$ и будет равно квантовому числу n_ρ , количество нодальных плоскостей определяется числом нулей функции H_{n_z} в области $z > 0$ и равно значению $(n_z - 1)/2$. Кроме этого, волновая функция параболической КТ может быть охарактеризована числом экстремумов. Легко определить, что электронная плотность на плоскости $\varphi = \text{const}$ имеет $(n_\rho + 1)(n_z + 1)/2$ локальных экстремумов: по $X_\rho = n_\rho + 1$ экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по $X_z = (n_z + 1)/2$ экстремумов в рядах, параллельных оси OZ .

В качестве характеристики, определяющей форму рассматриваемой квантовой точки, будем далее использовать параметр анизотропии

$$\gamma_\mu = \frac{k_z}{K} = \frac{k_z}{\sqrt{k_\rho^2 + \mu^2}}. \quad (7)$$

При $\mu = 0$ энергии параболической КТ определяются выражением

$$E = k_\rho(2n_\rho + |m| + 1) + k_z \left(n_z + \frac{1}{2}\right), \quad (8)$$

а параметр анизотропии примет вид $\gamma_0 = k_z/k_\rho$.

В частном случае $\gamma_\mu = 1$ получаем изотропную приповерхностную параболическую КТ, уравнение которой допускает разделение переменных уже в сферических координатах. Волновые функции имеют вид [9]:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = Y_{lm}(\theta, \varphi) r^l \exp\left(-\frac{kr^2}{4}\right) M\left(-n_r, l + \frac{3}{2}, \frac{kr^2}{2}\right), \quad (9)$$

где $k^2 = \mu^2 + k_\rho^2 + k_z^2$, Y_{lm} – сферические функции, M – вырожденная гипергеометрическая функция первого рода [19]. В выражении (9) $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – радиальное квантовое число, $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное число, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ – магнитное число. При этом для удовлетворения граничного условия (2) необходимо, чтобы разность $l - |m|$ была нечетной.

Энергии изотропной приповерхностной параболической КТ определяются выражением

$$E = k \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right) + m\mu. \quad (10)$$

Из (10) следует, что уровни энергии в изотропной КТ являются вырожденными при одинаковых $n = 2n_r + l$ и m , кратность вырождения уровней составляет $n/2$ для четных n и $(n + 1)/2$ – для нечетных. При нулевом магнитном поле состояния являются вырожденными при одинаковых n , независимо от m , кратность вырождения равна $(n + 1)(n + 2)/2$.

Нодальные поверхности волновых функций изотропной параболической КТ могут быть двух типов: сферы $r = \text{const}$ и поверхности конусов $\theta = \text{const}$. Количество нодальных сфер определяется числом положительных корней функции $M(-n_r, l + 3/2, x)$ и равно n_r , количество нодальных конусов определяется числом нулей функции Y_{lm} в области $z > 0$ и равно $(l - |m| - 1)/2$. Общее количество локальных экстремумов электронной плотности на каждой плоскости $\varphi = \text{const}$ будет составлять $(n_r + 1)(l - |m| + 1)/2$: по $n_r + 1$ экстремумов вдоль лучей $\theta = \text{const}$ и по $(l - |m| + 1)/2$ экстремумов вдоль кривых $r = \text{const}$.

Состояния электрически индуцированной квантовой точки. В случае, когда внешний потенциал создается электрическим полем дискообразного металлического затвора, оператор \hat{V}_G в уравнении (1), согласно [20], определяется выражением

$$\hat{V}_G = -\frac{2\Phi_0}{\pi} \arctg \left(\frac{d}{2} \sqrt{\frac{2}{\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4} + \left(\left(\rho^2 + z^2 - \frac{d^2}{4} \right)^2 + d^2 z^2 \right)^{1/2}}} \right), \quad (11)$$

где d – диаметр затвора, Φ_0 – потенциал затвора. На малых расстояниях от диска потенциал в направлении оси OZ близок к треугольному потенциалу. При удалении от диска в плоскости XOY потенциал вблизи минимума может быть аппроксимирован параболой. На больших расстояниях от затвора потенциал близок к кулоновскому. Поскольку потенциал \hat{V}_G является цилиндрически симметричным, то решение уравнения (1) можно представить в виде $\Psi(\rho, z, \varphi) = \psi(\rho, z) \exp(im\varphi)$. Тогда задача (1)–(2) сводится к двумерной:

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m^2}{\rho^2} + m\mu + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V}_G \right) \psi = E\psi, \quad z > 0, \quad (12)$$

$$\psi|_{z=0} = 0; \quad \psi \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty. \quad (13)$$

Задача (12)–(13) решалась численно с помощью метода конечных элементов. При этом полупространство $\rho > 0, z > 0$ заменялось ограниченной областью $0 < \rho < L_\rho, 0 < z < L_z$, а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. На границах $\rho = L_\rho, z = L_z$, функция ψ полагалась равной нулю, а величины L_ρ и L_z выбирались различными для разных состояний из условия минимума значения вычисляемого уровня энергии. Так как потенциал электрически индуцированной КТ при $\mu = 0$ на бесконечности стремится к нулю, то на больших расстояниях асимптотика волновых функций дается выражением $\psi \sim \exp(-\sqrt{-2Er})$, исходя из которого можно оценить погрешность, связанную с заданием нулевых граничных условий на поверхности цилиндра.

Зависимости значений энергий основного и нескольких низших возбужденных состояний электрона от потенциала затвора в нулевом магнитном поле приведены на рис. 1. Состояния нумеровались в порядке возрастания энергии отдельно для случаев $m = 0$ (σ -состояния), $|m| = 1$ (π -состояния). Состояния с $|m| = 2$ и $|m| = 3$ обозначались δ и γ соответственно. Как видно из рис. 1, для некоторых состояний происходит сближение (квазивырождение) уровней, не зависящее от потенциала на затворе Φ_0 (пары состояний σ_2 - δ_1 и σ_4 - δ_2).

Из рис. 2 видно, что состояния с близкими энергиями можно объединить в электронные оболочки. Расчеты, выполненные при других значениях потенциала затвора, показывают, что

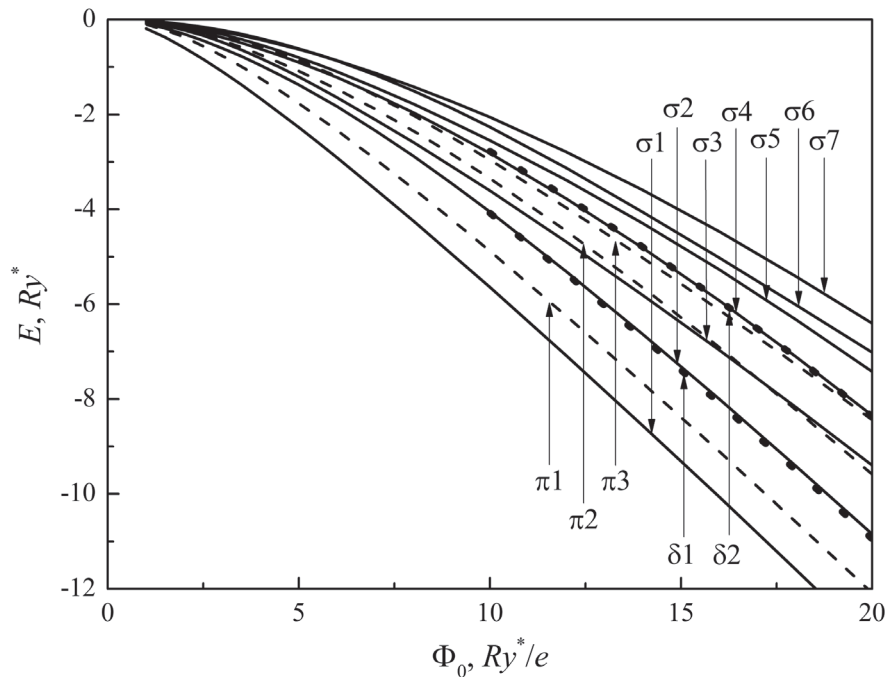


Рис. 1. Энергии основного и возбужденных состояний электрона, который находится в квантовой точке, индуцированной полем дискообразного затвора, в зависимости от потенциала на затворе в отсутствие магнитного поля: сплошные линии – зависимости для σ -состояний ($m = 0$), пунктирные линии – зависимости для π -состояний ($m = 1$), точки – энергии δ -состояний ($m = 2$); диаметр затвора $d = 6a^*$

Fig. 1. Ground and excited state energies of an electron at the quantum dot, induced by the field of the disc-shaped gate, as a function of gate potential at zero magnetic field. The solid lines show the dependences for σ -states ($m = 0$), the dash lines – the dependences for π -states ($m = 1$), the dots – the energies of δ -states ($m = 2$). The gate diameter $d = 6a^*$

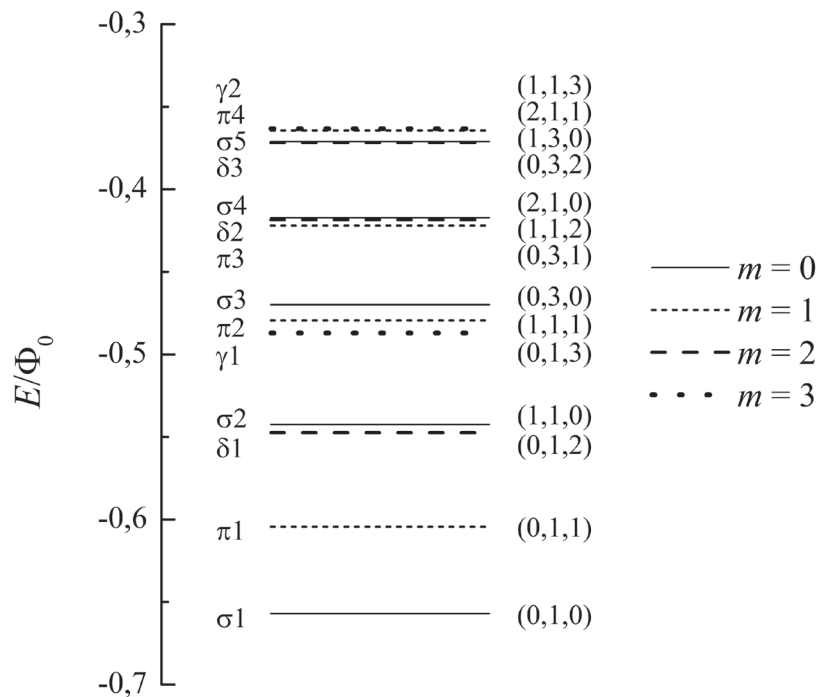


Рис. 2. Уровни энергии 14 низших состояний электрически индуцированной квантовой точки; $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$, $d = 6a^*$; значения энергий нормированы на величину потенциала затвора

Fig. 2. Energy levels of the 14 lowest states of the electrically induced quantum dot; $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$, $d = 6a^*$; energy values are normalized on the gate potential

объединение некоторых состояний в оболочку может как не зависеть от потенциала на затворе (например, пары состояний $\sigma 2\text{-}\delta 1$ и $\sigma 4\text{-}\delta 2$), так и происходить лишь при определенных значениях Φ_0 (как, например, состояние $\pi 3$).

Волновые функции, соответствующие различным значениям энергии и магнитного поля, приведены на рис. 3. Как видно, расположение экстремумов волновых функций электрически индуцированной КТ подобно расположению экстремумов волновых функций анизотропной приповерхностной параболической КТ: по X_ρ экстремумов в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по X_z экстремумов в рядах, параллельных оси OZ . Поэтому, помимо нумерации состояний в порядке возрастания в пределах одинаковых m , будем пользоваться классификацией, основанной на топологии волновых функций, и обозначать состояния тройкой чисел (n_ρ, n_z, m) , где $n_\rho = X_\rho - 1$, $n_z = 2X_z - 1$. Например, на рис. 3, *b* волновая функция $\sigma 5$ -состояния имеет по два

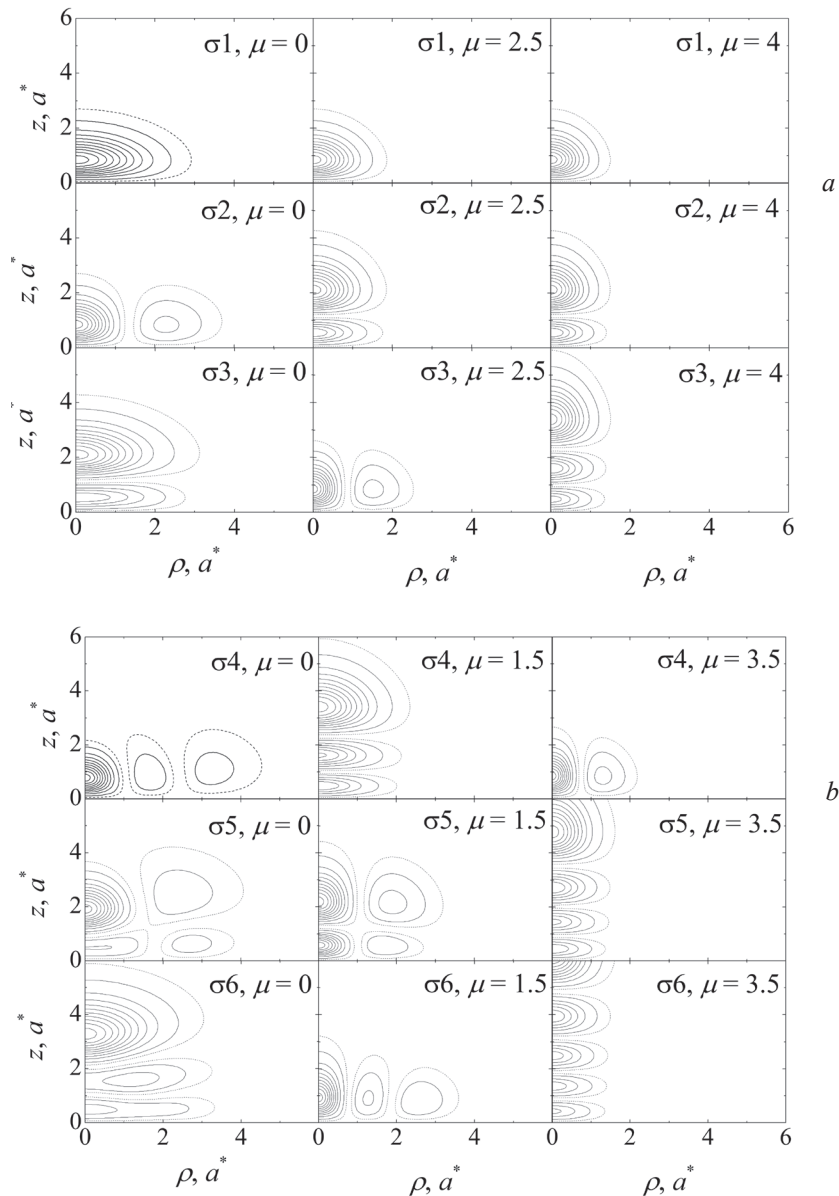


Рис. 3. Распределение электронной плотности $\sigma 1$ -, $\sigma 2$ -, $\sigma 3$ -состояний (a) и $\sigma 4$ -, $\sigma 5$ -, $\sigma 6$ -состояний (b) электрически индуцированной квантовой точки в отсутствие ($\mu = 0$) и при наличии ($\mu = 1,5; \mu = 2,5; \mu = 3,5; \mu = 4,0$) магнитного поля; расчет проводился при диаметре затвора $d = 6a^*$ и потенциале на затворе $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

Fig. 3. Electronic density distribution of $\sigma 1$ -, $\sigma 2$ -, $\sigma 3$ -states (a) and $\sigma 4$ -, $\sigma 5$ -, $\sigma 6$ -states (b) of the electrically induced quantum dot in the absence ($\mu = 0$) and in the presence ($\mu = 1.5, \mu = 2.5, \mu = 3.5, \mu = 4.0$) of the magnetic field; the calculations were carried out at the gate diameter $d = 6a^*$ and the gate potential $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

экстремума в рядах, перпендикулярных оси OZ , и по два экстремума в рядах, параллельных оси OZ . Тогда $n_p = 1$, $n_z = 3$, и $\sigma 5$ -состояние может быть охарактеризовано квантовыми числами $(1, 3, 0)$. Аналогично состояниям $\sigma 4$ и $\sigma 6$ соответствуют квантовые числа $(2, 1, 0)$ и $(0, 5, 0)$.

При увеличении магнитного поля происходит изменение пространственного расположения экстремумов волновых функций. Например, структура волновой функции $\sigma 2$ -состояния меняется с $(1, 1, 0)$ при $\mu = 0$ на $(0, 3, 0)$ при $\mu = 2,5$ (рис. 3, а). Для $\sigma 3$ -состояния имеет место обратный переход. Такие изменения происходят в точках квазипересечения (отталкивания) электронных уровней (точки A_1, A_2, A_3, B на рис. 4). Аналогичное отталкивание было обнаружено с помощью численных расчетов и для донорных состояний [21], однако в случае электрически индуцированной КТ квазипересечение происходит при относительно малых магнитных полях. Так, значение $\mu \approx 1,6$ является точкой отталкивания для $\sigma 2$ - и $\sigma 3$ -состояний (см. рис. 4), что соответствует $\sim 9,0$ Т для GaAs. Это магнитное поле значительно меньше, чем поля, при которых происходят квазипересечения донорных состояний [21].

С ростом магнитного поля энергии состояний с $n_p > 0$ (т. е. состояний, волновые функции которых имеют боковые экстремумы в плоскости XOY) возрастают быстрее, чем энергии состояний с $n_p = 0$. В результате, состояния с $n_p > 0$ с увеличением μ становятся более высоколежащими в группе состояний с одинаковыми значениями m . Как видно из рис. 3, состоянию $(1, 1, 0)$ соответствует $\sigma 2$ -состояние при $\mu = 0$, $\sigma 3$ – при $\mu = 2,5$ и $\sigma 4$ – при $\mu = 3,5$. Обратно, состояния с $n_p = 0$ с увеличением μ будут характеризоваться меньшими номерами, чем это было при отсутствии магнитного поля. Так, состоянию $(0, 5, 0)$ отвечает $\sigma 6$ -состояние для $\mu = 0$, $\sigma 4$ – для $\mu = 1,5$, $\sigma 3$ – для $\mu = 4,0$. Таким образом, как и следовало ожидать, при сильных магнитных полях более низкими значениями энергии обладают состояния с квантовыми числами $(0, n_z, m)$.

Отметим также, что для сильных магнитных полей происходит асимптотическое сближение уровней энергии с отрицательными m с соответствующими уровнями энергии с $m = 0$. Например, состояние $\pi 1$ при $m = -1$ асимптотически стремится к состоянию $\sigma 1$ для больших значений μ .

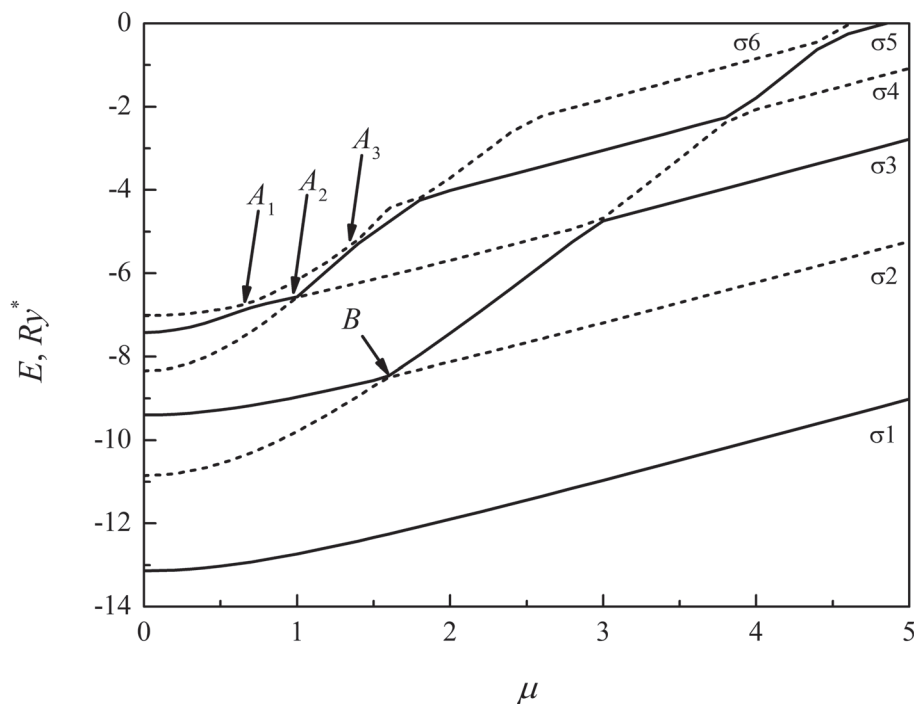


Рис. 4. Энергии основного и низших возбужденных состояний электрически индуцированной квантовой точки в зависимости от величины магнитного поля; расчет проводился для диаметра затвора $d = 6a^*$ и потенциала на затворе $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

Fig. 4. Ground and lowest excited state energies of the electrically induced quantum dot as a function of magnetic field; the calculations were carried out at the gate diameter $d = 6a^*$ and the gate potential $\Phi_0 = 20 Ry^*/e$

3. Обсуждение результатов. Модель анизотропной приповерхностной параболической КТ позволяет качественно описать изменения энергетического спектра и волновых функций при изменении потенциала на затворе и приложении магнитного поля.

Рассмотрим сначала, как можно описать энергетическую структуру электрически индуцированной квантовой точки в отсутствие магнитного поля. Во-первых, модель приповерхностной параболической КТ позволяет предсказать вырождение состояний с одинаковыми $n = 2n_\rho + |m|$ и n_z . Как видно из рис. 2, уровни соответствующих состояний электрически индуцированной КТ также близки друг к другу. То есть уровни состояний $\sigma 2$ - $\delta 1$, $\pi 2$ - $\gamma 1$, $\sigma 4$ - $\delta 2$, $\pi 4$ - $\gamma 2$, $\sigma 5$ - $\delta 3$ можно рассматривать как квазивырожденные. Такое квазивырождение будет иметь место при любых потенциалах на затворе.

Во-вторых, вырождение уровней параболической КТ может возникать при определенных значениях параметра анизотропии. Для двух состояний с квантовыми числами $(n_\rho^{(1)}, n_z^{(1)}, m^{(1)})$ и $(n_\rho^{(2)}, n_z^{(2)}, m^{(2)})$ такие значения определяются выражением

$$\gamma_0 = - \frac{2(n_\rho^{(1)} - n_\rho^{(2)}) + |m^{(2)}| - |m^{(1)}|}{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}}. \tag{14}$$

В качестве примера рассмотрим вырождение уровней при $\gamma_0 = 1,5$. Тогда условию (14) удовлетворяют состояния (1, 3, 0), (2, 1, 1), (0, 3, 2) и (1, 1, 3). Для электрически индуцированной квантовой точки им соответствуют состояния $\sigma 5$, $\pi 4$, $\delta 3$, $\gamma 2$. Их близость друг к другу (см. рис. 2) свидетельствует о том, что этим уровням электрически индуцированной КТ можно приписать эффективный параметр анизотропии, близкий к 1,5.

Действительно, если ввести для электрически индуцированной квантовой точки понятия эффективных значений k_ρ и k_z , то их можно определить по аналогии с параболической квантовой точкой из рассчитанных значений энергий. Так, из выражения (7) для энергии параболической КТ следует, что $k_{\rho j}^{(m)} = E_j^{(m+1)} - E_j^{(m)}$, где $E_j^{(m)}$ – энергия j -го состояния для магнитного квантового числа m . Эффективное значение $k_{zj}^{(m)}$ для электрически индуцированной КТ можно найти, зная энергии двух состояний со значениями n_z , отличающимися на 1. Вычисленный таким образом эффективный параметр анизотропии $(\gamma_{eff}^{(m)})$ при $\Phi_0 = 20Ry^*/e$ составляет $\sim 1,78$ для $\sigma 1$ -состояния, $\sim 1,45$ для $\delta 1$ -состояния, $\sim 1,24$ для $\sigma 3$ -состояния, $\sim 1,11$ для $\delta 3$ -состояния. Видно, что эффективный параметр анизотропии будет убывать для состояний с более высокими значениями энергии. Это отражается и на структуре расположения экстремумов волновых функций. Как показывают численные расчеты, для высоколежащих состояний расположение экстремумов будет соответствовать расположению экстремумов уже изотропной параболической КТ, nodальные поверхности которой представляют собой конусы и сферы.

С ростом потенциала на затворе значение $\gamma_{eff}^{(m)}$ увеличивается: эффективный параметр анизотропии для $\sigma 1$ -состояния составляет $\sim 1,33$ при $\Phi_0 = 10Ry^*/e$ и $\sim 2,11$ при $\Phi_0 = 30Ry^*/e$. В результате для электрически индуцированной КТ с изменением величины потенциала на затворе возможно квазипересечение электронных уровней. Например, расчеты показали, что при $d = 6a^*$ и $\Phi_0 \approx 35Ry^*/e$ находится точка отталкивания уровней $\sigma 6$ - и $\sigma 7$ -состояний, при этом структура $\sigma 6$ -состояния меняется с (0, 5, 0) на (3, 1, 0), структура $\sigma 7$ -состояния – с (3, 1, 0) на (0, 5, 0). При больших значениях $\gamma_{eff}^{(m)}$ минимальными значениями энергии обладают состояния, все экстремумы волновых функций которых будут располагаться вдоль затвора, т. е. самыми низколежащими будут состояния вида $(n_\rho, 1, m)$. В этом случае квантовую точку можно считать квазидвумерной.

При приложении магнитного поля появляются новые точки пересечения состояний параболической КТ. Их положение в зависимости от магнитного поля можно определить из соотношения

$$K\left(2n_p^{(1)} - 2n_p^{(2)} + \left|m^{(1)}\right| - \left|m^{(2)}\right|\right) + k_z\left(n_z^{(1)} - n_z^{(2)}\right) + \mu\left(m^{(1)} - m^{(2)}\right) = 0.$$

При $\gamma_\mu = 1$ происходят пересечения уровней параболической КТ, вызванные вырождением анизотропной параболической КТ в изотропную. Этим пересечениям соответствуют точки отталкивания электрически индуцированной КТ, обозначенные A_1, A_2, A_3 для σ_4 -, σ_5 -, σ_6 -состояний и B для σ_2 -, σ_3 -состояний (см. рис. 4). При этом для различных состояний изменяется значение $\gamma_{\text{eff}}^{(m)}$, поэтому отталкивание, соответствующее $\gamma_\mu = 1$, происходит при различных значениях μ . В результате изменение σ_4 -уровня с состояния $(2, 1, 0)$ при $\mu = 0$ на состояние $(0, 5, 0)$ при $\mu = 1,5$ и σ_6 -уровня с состояния $(0, 5, 0)$ при $\mu = 0$ на состояние $(2, 1, 0)$ при $\mu = 1,5$, показанное на рис. 3, b , происходит в трех точках A_1, A_2, A_3 (см. рис. 4). Точки квазипересечения электрически индуцированной КТ для более высоких магнитных полей (см. рис. 4) соответствуют значениям магнитного поля, определяемого выражением

$$\mu^2 = \left(k_z \frac{n_z^{(1)} - n_z^{(2)}}{2(n_p^{(1)} - n_p^{(2)})} \right)^2 - k_p^2. \quad (15)$$

Точкам квазипересечения электрически индуцированной КТ, удовлетворяющим этому условию, будут соответствовать разные значения μ , что вызвано отличиями в значениях эффективного параметра анизотропии для различных состояний.

В случае больших магнитных полей получаем $\gamma_\mu \ll 1$, и квантовая точка вырождается в квазиодномерную систему, волновые функции которой имеют экстремумы вдоль оси OZ и только нодальные плоскости, параллельные плоскости $z = 0$. Как и в случае электрически индуцированной КТ, для состояний с одинаковыми значениями n_p и n_z при больших μ происходит приближение уровней с отрицательными m к соответствующему уровню с $m = 0$.

Использование модели анизотропной параболической КТ имеет некоторые ограничения. Так, при малых Φ_0 основная часть области локализации волновых функций высоковозбужденных состояний находится в области $r \gg d$, где потенциал можно приближенно полагать равным $\hat{V}_G \approx 2\Phi_0/\pi r$, поэтому \hat{V}_G плохо аппроксимируется анизотропным параболическим потенциалом.

Проведенные нами численные эксперименты являются в определенной степени аналогом экспериментальных исследований по определению энергетического спектра изолированной квантовой точки, которые, например, можно проводить посредством транспортной спектроскопии, когда изучаются туннельные переходы между квантовой точкой и донором [22]. Однако поскольку в реальности потенциал локализации электрона, создаваемый внешними электродами сложной формы, неизвестен, то необходима разработка подходов к анализу экспериментальных данных. В настоящей работе предложен один из возможных вариантов такого подхода. Например, полученное качественное описание структуры волновых функций и их изменения во внешних полях может применяться для оценки вероятностей переходов при изучении оптических и транспортных свойств квантовых точек. Кроме того, результаты по пространственной структуре волновых функций могут быть использованы для выбора оптимального базиса при моделировании энергетического спектра многоэлектронных состояний КТ, образованных с помощью внешних электродов.

Заключение. В работе проведено численное моделирование возбужденных состояний квантовой точки, индуцированной электрическим полем дискообразного затвора. Показано, что на основе модели анизотропной приповерхностной параболической квантовой точки может быть предложена классификация состояний электрически индуцированной КТ, а также дано качественное описание влияния величины электрического и магнитного полей на волновые функции и энергии электрона. В частности, показано, что использование модели приповерхностной параболической КТ позволяет предсказать точки квазипересечения уровней электрически индуцированной квантовой точки.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Kastner, M. A. Artificial atoms / M. A. Kastner // *Physics Today*. – 1993. – Vol. 46, № 1. – P. 24–31.
2. Ashoori, R. C. Electrons in artificial atoms / R. C. Ashoori // *Nature*. – 1996. – Vol. 379, № 6564. – P. 413–419.
3. Shell filling and spin effects in a few electron quantum dot / S. Tarucha [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, № 17. – P. 3613–3616.
4. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells / J. Wu [et al.] // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – 2015. – Vol. 48, № 36. – P. 363001.
5. Silicon quantum electronics / F. A. Zwanenburg [et al.] // *Rev. Mod. Phys.* – 2013. – Vol. 85, № 3. – P. 961–1019.
6. Loss, D. Quantum computation with quantum dots / D. Loss, D. P. DiVincenzo // *Phys. Rev. A*. – 1998. – Vol. 57, № 1. – P. 120–126.
7. Reimann, S. M. Electronic structure of quantum dots / S. M. Reimann, M. Manninen // *Rev. Modern Phys.* – 2002. – Vol. 74. – P. 1283–1342.
8. Ciftja, O. Understanding electronic systems in semiconductor quantum dots / O. Ciftja // *Phys. Scr.* – 2013. – Vol. 88. – P. 058302.
9. Flügge, S. *Practical Quantum Mechanics: in 2 vol.* / S. Flügge. – [S. l.]: Springer-Verlag, 1971. – Vol. 1. – 286 p.
10. Fujito, M. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots / M. Fujito, A. Natori, H. Yasunaga // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 53, № 15. – P. 9952–9958.
11. Willatzen, M. *Separable Boundary-Value Problems in Physics* / M. Willatzen, Lok C. Lew Yan Voon. – [S. l.]: Wiley-VCH, 2011. – 377 p.
12. Lok C. Lew Yan Voon. Confined states in lens-shaped quantum dots / Lok C. Lew Yan Voon, M. Willatzen // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2002. – Vol. 14. – P. 13667–13678.
13. Kumar, A. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field / A. Kumar, S. E. Laux, F. Stern // *Phys. Rev. B*. – 1990. – Vol. 42, № 8. – P. 5166–5175.
14. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // *Nature (London)*. – 1998. – Vol. 393. – P. 133–137.
15. Single-atom transistor / M. Feuchtle [et al.] // *Nature nanotechnology*. – 2012. – Vol. 7, № 4. – P. 242–246.
16. Manipulation of a single charge in a double quantum dot / J. R. Petta [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, № 18. – P. 186802.
17. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G. D. J. Smit [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2003. – Vol. 68, № 19. – P. 193302.
18. Levchuk, E. A. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate / E. A. Levchuk, L. F. Makarenko // *Semiconductors*. – 2016. – Vol. 50, № 1. – P. 89–96.
19. Arfken, G. *Mathematical Methods for Physicists* / G. Arfken. – [S. l.]: Academic Press, 2013. – 985 p.
20. Smythe, W. R. *Static and Dynamic Electricity* / W. R. Smythe. – New York: McGraw-Hill, 1989. – 845 p.
21. Zimmerman, M. L. Evidence of an approximate symmetry for hydrogen in a uniform magnetic field / M. L. Zimmerman, M. M. Kash, D. Kleppner // *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – Vol. 45, № 13. – P. 1092–1094.
22. Quantum dot spectroscopy using single phosphorus donor / H. Büch [et al.] // *Phys. Rev. B*. – 2015. – Vol. 92, № 23. – P. 235309.

References

1. Kastner M. A. Artificial atoms. *Physics today*, 1993, vol. 46, no. 1, pp. 24–31. Doi: 10.1063/1.43770
2. Ashoori R. C. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 1996, vol. 379, no. 6564, pp. 413–419. Doi: 10.1038/379413a0
3. Tarucha S., Austing D. G., Honda T., Van der Hage R. J., Kouwenhoven L. P. Shell filling and spin effects in a few electron quantum dot. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, no. 17, pp. 3613–3616. Doi: 10.1103/physrevlett.77.3613
4. Wu J., Chen S., Seeds. A., Liu H. Quantum dot optoelectronic devices: lasers, photodetectors and solar cells. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2015, vol. 48, no. 36, pp. 363001. Doi: 10.1088/0022-3727/48/36/363001
5. Zwanenburg F. A., Dzurak A. S., Morello A., Simmons M. Y., Hollenberg L. C., Klimeck G., Rogge S., Coppersmith S. N., Eriksson M. A. Silicon quantum electronics. *Reviews of Modern Physics*, 2013, vol. 85, no. 3, pp. 961–1019. Doi: 10.1103/revmodphys.85.961
6. Loss D., DiVincenzo D. P. Quantum computation with quantum dots. *Physical Review A*, 1998, vol. 57, no. 1, pp. 120–126. Doi: 10.1103/physreva.57.120
7. Reimann S. M., Manninen M. Electronic structure of quantum dots. *Reviews of Modern Physics*, 2002, vol. 74, pp. 1283–1342. Doi: 10.1103/revmodphys.74.1283
8. Ciftja O. Understanding electronic systems in semiconductor quantum dots. *Physica Scripta*, 2013, vol. 88, p. 058302. Doi: 10.1088/0031-8949/88/05/058302
9. Flügge S. *Practical Quantum Mechanics. Vol. 1.* Springer-Verlag, 1971, 286 p. Doi: 10.1007/978-3-642-61995-3
10. Fujito M., Natori A., Yasunaga H. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots. *Physical Review B*, 1996, vol. 53, no. 15, pp. 9952–9958. Doi: 10.1103/physrevb.53.9952
11. Willatzen M., Lok C. Lew Yan Voon. *Separable Boundary-Value Problems in Physics*. Wiley-VCH, 2011, 377 p. Doi: 10.1002/9783527634927
12. Lok C. Lew Yan Voon, Willatzen M. Confined states in lens-shaped quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, vol. 14, pp. 13667–13678. Doi: 10.1088/0953-8984/14/49/321

13. Kumar A., Laux S. E., Stern F. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field. *Physical Review B*, 1990, vol. 42, no. 8, pp. 5166–5175. Doi: 10.1103/physrevb.42.5166
14. Kane B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature* (London), 1998, vol. 393, pp. 133–137. Doi: 10.1038/30156
15. Fuechsle M., Miwa J. A., Mahapatra S., Ryu H., Lee S., Warschkow O., Hollenberg L. C., Klimeck G., Simmons M. Y. Single-atom transistor. *Nature nanotechnology*, 2012, vol. 7, no. 4, pp. 242–246. Doi: 10.1038/nnano.2012.21
16. Petta J. R., Johnson A. C., Marcus C. M., Hanson M. P., Gossard A. C. Manipulation of a single charge in a double quantum dot. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 93, no. 18, p. 186802. Doi: 10.1103/physrevlett.93.186802
17. Smit G. D. J., Rogge S., Caro J., Klapwijk T. M. Gate-induced ionization of single dopant atoms. *Physical Review B*, 2003, vol. 68, no. 19, p. 193302. Doi: 10.1103/physrevb.68.193302
18. Levchuk E. A., Makarenko L. F. On controlling the electronic states of shallow donors using a finite-size metal gate. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 1, pp. 89–96. Doi:10.1134/s1063782616010127
19. Arfken G. *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 2013, 985 p.
20. Smythe W. R. *Static and dynamic electricity*. New York, McGraw-Hill, 1989, 845 p.
21. Zimmerman M. L., Kash M. M., Kleppner D. Evidence of an approximate symmetry for hydrogen in a uniform magnetic field. *Physical Review Letters*, 1980, vol. 45, no. 13, pp. 1092–1094. Doi: 10.1103/physrevlett.45.1092
22. Büch H., Fuechsle M., Baker W., House M. G., Simmons M.Y. Quantum dot spectroscopy using a single phosphorus donor. *Physical Review B*, 2015, vol. 92, no. 23, p. 235309. Doi: 10.1103/physrevb.92.235309

Информация об авторах

Левчук Елена Александровна – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com.

Макаренко Леонид Федорович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математического моделирования и управления, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: makarenko@bsu.by

Information about the authors

Elena A. Levchuk – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: liauchuk.alena@gmail.com

Leonid F. Makarenko – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Assistant Professor of the Mathematical Modeling and Control Department, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: makarenko@bsu.by