

Spis treści

1	Wstęp.	3
1.1	Heterostruktura.	4
1.2	Nanourządzenie.	6
1.3	Cel pracy.	7
1.4	Układ pracy.	8
2	Urządzenie dwuelektrodowe posiadające symetrię cylindryczną.	10
2.1	Spektroskopia pojemnościowa.	11
2.2	Potencjał pola elektrostatycznego i jego źródła.	12
2.3	Procedura numeryczna wyznaczania potencjału.	13
2.4	Warunki brzegowe dla rozwiązania równania Poissona.	16
2.5	Samouzgodnienie pole-ładunek.	18
2.6	Odtworzenie wyników eksperymentalnych.	21
2.7	Dwa obszary lokalizacji elektronu.	24
2.8	Kształt potencjału uwięzienia.	26
2.9	Optymalizacja parametrów nanourządzenia.	30
2.10	Podsumowanie i wnioski.	35
3	Urządzenie wieloelektrodowe.	37
3.1	Potencjał pola elektrostatycznego i jego źródła.	40
3.2	Rozkład potencjału i gęstości ładunku elektronowego w obszarze asymptotycznym.	42
3.3	Rozkład potencjału i gęstości ładunku elektronowego w pobliżu elektrod.	46
3.4	Warunek brzegowy dla rozwiązania równania Poissona.	47
3.5	Procedura numeryczna, samouzgodnienie pole-ładunek.	49
3.6	Parametr dopasowania.	51
3.7	Rozkład potencjału w nanourządzeniu.	52
3.8	Kanały transmisji.	53

3.9	Linie transmisji.	57
3.10	Rozkład ładunków w nanourządzeniu.	59
3.11	Wpływ ładunku elektronów uwięzionych w kropce na pozostałe ładunki.	62
3.12	Podsumowanie.	63
4	Problem Poissona-Schrödingera dla elektronu uwięzionego w studni kwantowej, w sąsiedztwie metalowej elektrody.	64
4.1	Wprowadzenie.	64
4.2	Problem Poissona-Schrödingera.	66
4.3	Samouzgodnienie pole-ładunek.	68
4.4	Formowanie kształtu funkcji falowej elektronu znajdującego się poniżej elektrody.	69
4.5	Badanie lokalnych minimów energii elektronu.	71
4.6	Rozkłady ładunków i potencjału elektrostatycznego.	72
4.7	Zależność energii od wybranych parametrów geometrycznych nanostruk- tury.	74
4.8	Podsumowanie i wnioski.	75
5	Dyskusja wyników i wnioski.	76
5.1	Podsumowanie.	83
6	Dodatek.	84
6.1	Metoda rozwiązywania równania Schrödingera dla stanów jednoelek- tronowych.	84
6.2	Metoda rozwiązywania równania Schrödingera dla układów wieloelek- tronowych.	89

Rozdział 1

Wstęp.

Kropka kwantowa [1, 2] jest układem o wielkości od kilku do kilkuset nm¹, w którym więzi się elektrony. Ruch uwięzionych elektronów jest ograniczony we wszystkich kierunkach, dlatego podobnie jak w atomie znajdują się one w stanach o dobrze rozdzielonych, dyskretnych energiach. Z tego powodu kropki kwantowe nazywa się również sztucznymi atomami, z tą różnicą, że w naturalnych atomach elektrony są więzione przez potencjał kulombowski, natomiast w sztucznym przez zewnętrzny potencjał tzw. *potencjał uwięzienia*. Potencjał uwięzienia można modyfikować, co prowadzi do zmiany własności kropki kwantowej i układu elektronów w niej związanych. Ta własność sztucznych atomów może być wykorzystana w fizyce do budowy swego rodzaju laboratorium mechaniki kwantowej, a w elektronice do konstrukcji maksymalnie zminiaturyzowanych elementów logicznych [3–10] lub części komputera kwantowego² [15–18]. Szerokie możliwości potencjalnego wykorzystania sztucznych atomów spowodowały ich intensywne badania eksperymentalne [6, 19–23] i teoretyczne [24–28].

Kropki kwantowe są bardzo ogólnym pojęciem, mogą je stanowić na przykład trzymane pomiędzy elektrodami pojedyncze molekuly organiczne [29], metalowe i nadprzewodzące "wyspy" [7, 30] lub nanorurki węglowe [31]. Najczęściej sztuczne atomy wytwarza się w materiałach półprzewodnikowych, np. kropki kwantowe samorosnące [32] lub sterowane elektrostatycznie [6, 23, 33]. Kropki samorosnące znalazły już zastosowanie do budowy bardzo dobrej jakości laserów [34, 35] oraz w biologii do badania i oznaczania komórek [36].

¹Przyjęliśmy powszechnie używane w literaturze jednostki. Energię przedstawimy w [eV] lub [meV], miarą długości będzie [nm] lub (rzadko) [μm], a gęstości powierzchniowej ładunku [e/cm^{-2}].

²Na komputerze kwantowym można rozwiązać wiele problemów znacznie szybciej niż na komputerze klasycznym [11], np. całkowanie [12] czy przeszukiwanie baz danych [13]. Różnica w szybkości obliczeń np. dla problemu dekodowania zaszyfrowanych wiadomości [14] praktycznie decyduje o rozwiązywalności problemu.

W tej pracy skoncentrujemy uwagę na tzw. sterowanych elektrostatycznie poziomych kropkach kwantowych [20–23,33,37–55]. Kropki te generowane są w nanourządzeniach³ półprzewodnikowych, charakteryzujących się stosunkowo prostym procesem produkcji, łatwością integracji z już istniejącą elektroniką oraz dużą skalowalnością. Regulowanie potencjału uwięzienia - *sterowanie kropką* jest łatwe, odbywa się przez przyłożenie odpowiedniego napięcia do elektrod stanowiących część nanourządzenia. Zaletą tych konstrukcji jest możliwość ustalenia wszystkich istotnych parametrów kropek w procesie produkcji lub ich zmiany podczas pracy.

1.1 Heterostruktura.

Elektrostatyczne poziome kropki kwantowe tworzone są w heterostrukturach półprzewodnikowych [56,57], które posiadają postać nałożonych na siebie warstw zbudowanych z różnych materiałów półprzewodnikowych.

Istotnym elementem heterostruktury jest styk dwóch materiałów tzw. heterozłącze, w którym tworzy się schodek energii potencjalnej. W jednej z warstw energia potencjalna elektronu na dnie pasma przewodnictwa jest znacząco wyższa, przez co stanowi dla niego barierę potencjału.

Heterostruktura zawierająca trzy warstwy, z których w środkowej energia elektronu jest niższa niż w warstwach zewnętrznych, stanowi studnię kwantową.

W pracy będą rozważane heterostruktury na bazie GaAs oraz stopu AlGaAs, charakteryzujących się doskonałą jakością heterozłącza, wynikającą z niemal tej samej stałej sieci w obu materiałach [58]. Dzięki temu w heterostrukturze nie powstają naprężenia ani defekty. Schodek energii potencjalnej powstaje dzięki temu, że przerwa energetyczna pomiędzy dnem pasma przewodnictwa a wierzchołkiem pasma walencyjnego ma różną szerokość w różnych materiałach. Poziomy energetyczne po obu stronach heterozłącza układają się w taki sposób, żeby środek przerwy energetycznej leżał na jednym poziomie w obu materiałach. Energia potencjalna elektronu na dnie pasma przewodnictwa będzie przyjmowała niższe wartości po stronie materiału o mniejszej szerokości przerwy. Wysokość schodka wynikającą z różnicy położenia dna pasma przewodnictwa U_{band} łatwo jest wyznaczyć, jeśli znamy skład materiałowy. Dla rozważanych w rozprawie struktur zbudowanych z GaAs:Al_xGa_{1-x}As U_{band} wynosi [58] :

³Ze względu na rozmiar rozważanych urządzeń, w dalszej części pracy będziemy mówić o nanourządzeniach i nanostrukturach

$$U_{band} = 0.75 \cdot x . \quad (1.1)$$

Heterostruktury na bazie GaAs i AlGaAs wytwarza się w technologii *epitaksji z wiązki molekularnej* (ang. Molecular Beam Epitaxy - MBE) [59].

W technolgi tej na odpowiednio spreparowaną warstwę podłożową, wytwarzaną np. metodą Czochralskiego, nanoszony jest dany materiał (np. GaAs) warstwa atomowa po warstwie atomowej. Powstałe w ten sposób heterostruktury posiadają zadany, bardzo dokładny układ warstw. Heterozłącze jest bardzo gładkie, „chropowatość” granicy pomiędzy warstwami GaAs i AlGaAs jest rzędu dwóch stałych sieci.

Przyjmijmy intuicyjny układ odniesienia zgodny z kierunkiem wzrostu, w którym podłoże i warstwy najwcześniej naniesione są „na dole”, a warstwy naniesione jako ostatnie są „na górze”. Znajdujący się w górnej części heterostruktury AlGaAs oraz niektóre warstwy GaAs przy podłożu domieszkuje się donorami [60]. W technologii MBE uzyskuje się precyzyjne rozmieszczenie domieszek w kierunku wzrostu, gdyż domieszkowanie realizuje się przez dodanie atomów mających stanowić domieszki przy nanoszeniu danej warstwy. W kierunku równoległym do warstw rozkład domieszek jest przypadkowy.

Używane są dwa typy domieszkowania: objętościowe, w którym domieszkuje się wiele warstw atomowych oraz tzw. domieszkowanie typu δ [61] (δ -doping), w którym domieszkowana jest jedna monowarstwa atomowa. W rozprawie domieszkowanie typu δ przybliżymy domieszkowaniem objętościowym. Jako domieszki typu n używa się krzemu, który wewnątrz AlGaAs czy GaAs nie dyfunduje oraz nie ma tendencji do tworzenia osobnych warstw. Krzem może zajmować pozycję glinu-galu i arsenu, przez co może stanowić domieszkę zarówno typu n , jak i p . Domieszki różnych typów ulegają kompensacji, zatem efektywna gęstość domieszkowania będzie równa różnicy gęstości domieszek typu n i typu p . Ilość domieszek typu donorowego (a więc i akceptorowego) w danym materiale zależy od technologii wytworzenia [62] i zmienia się w zakresie 40%-95%.

Określenia „domieszki” czy „donory” będziemy używali tylko w stosunku do domieszek (donorów), które nie uległy kompensacji.

W zależności od gęstości domieszkowania półprzewodnik będzie wykazywał różne własności fizyczne [63]. Dla niewielkiej gęstości domieszkowania ($< 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) istotne będzie tylko oddziaływanie elektronu z dodatnim centrum donorowym, na których dany elektron jest zlokalizowany. Powstanie jeden poziom donorowy znajdujący się ok. 5 meV poniżej dna pasma przewodnictwa.

Gdy domieszkowanie będzie większe (n^+), elektrony zlokalizowane na donorach będą oddziaływać z sąsiednimi centrami donorowymi oraz z pozostałymi elektronami.

Poziom donorowy ulegnie rozszczepieniu i powstanie wąskie pasmo donorowe.

Dla bardzo dużego domieszkowania (n^{++} rzędu 10^{19} cm^{-3}) pasmo donorowe poszerza się i łączy z pasmem walencyjnym. Taki materiał jest przewodnikiem.

Własności przewodzące ma również *dwuwymiarowy gaz elektronowy* (2 Dimensional Electron Gas - 2DEG), który tworzy się w heterostrukturze zbudowanej z GaAs i domieszkowanego donorami nAlGaAs. Część elektronów przejdzie z poziomów donorowych do GaAs, który posiada niżej położone niż AlGaAs dno pasma przewodnictwa. Elektrony w GaAs będą przyciągane do heterozłącza przez dodatni ładunek zjonizowanych donorów. Ich ruch w kierunku prostopadłym do warstw jest ograniczany, a w pozostałych dwóch wymiarach swobodny, dzięki czemu 2DEG może przewodzić prąd tylko wzdłuż warstw.

Stykającej się z GaAs warstwy AlGaAs o grubości kilkunastu-kilkudziesięciu nm nie domieszkuje się w celu zmniejszenia wpływu potencjału pochodzącego od ładunku przypadkowo rozłożonych zjonizowanych donorów tzw. *potencjału fluktuującego*.

Potencjał fluktuujący pogarsza jakość 2DEG oraz wprowadza zaburzenia do potencjału w kropce kwantowej.

1.2 Nanourządzenie.

Nanourządzenia, w których generowane są poziome kropki kwantowe zbudowane są z heterostruktury oraz położonych na niej metalowych elektrod *sterujących*, które służą do kształtowania potencjału uwięzienia w kropce kwantowej.

Elektrody sterujące są nakładane na znajdującą się na powierzchni heterostruktury warstwę $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Bariera Schottky'ego występująca na styku metal-półprzewodnik pomiędzy tą warstwą a elektrodami jest wysoka (ok. 0.87 eV), co uniemożliwia przepływ elektronów do heterostruktury. Z tego powodu warstwa AlGaAs sąsiadująca z elektrodami stanowi warstwę blokującą.

Jedna z elektrod (uziemienie) połączona jest *złączem omowym* z dwuwymiarowym gazem elektronowym znajdującym się w dolnej części heterostruktury. Złącze omowe stosuje się w celu zminimalizowania wpływu bariery Schottky'ego. Stanowi je obszar bardzo silnie domieszkowanego półprzewodnika sąsiadującego z metalową elektrodą. Ze znajdujących się najbliżej metalu poziomów donorowych elektrony przejdą do metalu, powodując ugięcie dna pasma przewodnictwa i wyrównanie się poziomu Fermiego

w metalu z poziomem Fermiego w gazie elektronowym w półprzewodniku. Za poziom Fermiego w całym nanourządzeniu przyjmujemy zatem energię Fermiego w rezerwuarze elektronów - dwuwymiarowym gazie elektronowym.

Kropkę kwantową generuje się przez przyłożenie ujemnych napięć pracy pomiędzy uziemione złącze omowe i odpowiednio ukształtowane elektrody sterujące⁴. Spod elektrod sterujących otaczających planowany obszar kropki kwantowej dwuwymiarowy gaz elektronowy zostanie wypchnięty do rezerwuaru. Obszar „wypchnięcia” przypomina pierścień, wewnątrz którego znajduje się mała „kałuża”, stanowiąca sztuczny atom zawierający kilka-kilkadziesiąt elektronów.

Potencjał uwięzienia w kierunku prostopadłym do warstw jest wynikiem przyciągania elektronów do heterozłącza przez zjonizowane donory.

Planowaną geometrię elektrod sterujących uzyskuje się przez zastosowanie litografii wiązką elektronową [64]. W tej technologii wytwarza się elektrody [65] oraz wpływające na kształt elektrod nano-elementy półprzewodnikowe [6,66], mające postać nanowalców nałożonych na powierzchnię heterostruktury. Po wytworzeniu heterostruktury pokrywa się ją polimerem, którego łańcuchy w miejscach zaplanowanych elektrod lub poza walcami uszkadza się wiązką elektronową.

Po usunięciu uszkodzonych łańcuchów polimeru, w miejscu planowanych elektrod nanoszona jest warstwa metalu (tytanu, potem złota), a nadmiar materiału półprzewodnikowego poza walcem usuwa się wiązką jonów. W wyniku procesów technologicznych kształt elektrod nieco odbiega od planowanego. Spowodowane to jest między innymi odbijaniem elektronów na granicy polimer-półprzewodnik, nierównoległością wiązki jonów, wnikaniem atomów metalu do półprzewodnika lub rozchodzeniem się metalu na boki przy dolnej podstawie. Z tych powodów budowa elektrod nie jest tak dobrze określona jak budowa heterozłącza.

1.3 Cel pracy.

Eksperymentalne wyznaczenie potencjału uwięzienia w kropkach kwantowych jest niemożliwe, dlatego w większości prac teoretycznych dotyczących sztucznych atomów przyjmuje się zewnętrzny potencjał uwięzienia w postaci przybliżonej, najczęściej potencjału oscylatora harmonicznego [67,68], prostokątnej studni potencjału lub jamy potencjału o przebiegu gaussowskim [69].

⁴W dalszej części rozprawy zamiast „napięcie pracy przyłożone pomiędzy uziemione złącze omowe a elektrodę sterującą X” będziemy pisali krótko „napięcie na X”.

Użycie modelowego potencjału uwięzienia znacznie upraszcza opis kropki kwantowej, jednak nie pozwala uwzględnić jego zależności od napięć przyłożonych do elektrod oraz ilości elektronów uwięzionych w kropce.

W pewnych szczególnych przypadkach można wyliczyć potencjał uwięzienia z pierwszych zasad. Udaje się to wykonać w niektórych kropkach samorosnących oraz w kropkach elektrostatycznych. Kropki samorosnące wytwarza się przez naniesienie na podłoże kilku monowarstw półprzewodnika o znacznym niedopasowaniu stałej sieci. Całkowity potencjał uwięzienia w tych kropkach pochodzi od heterozłącza oraz naprężeń sieci powstałych w skutek niedopasowania stałych sieciowych. W tych układach potencjał uwięzienia dla elektronów można wyznaczyć stosując metodę opartą na teorii sprężystości [70].

Celem niniejszej rozprawy jest wyznaczenie potencjału uwięzienia dla kropek kwantowych generowanych elektrostatycznie. W tych układach potencjał uwięzienia generowany jest przez przyłożone do elektrod napięcia. Można wyliczyć go z pierwszych zasad elektrostatyki rozwiązując równanie Poissona. Potencjał uwięzienia zależy od rozkładu ładunku uwięzionych w nim elektronów, który wyznaczymy przez rozwiązanie równania Schrödingera. Rozkład zależnych od siebie potencjału elektrostatycznego oraz ładunku elektronów nazywany jest *problemem Poissona-Schrödingera* [71]. W rozprawie opracujemy teorię pozwalającą rozwiązać numerycznie problem Poissona-Schrödingera w wybranych nanourządzeniach.

W literaturze można znaleźć kilka prac, w których rozwiązano numerycznie problem Poissona-Schrödingera w nanostrukturach półprzewodnikowych.

W pracy [72] przebadano urządzenie dwuelektrodowe posiadające symetrię osiową. W pracach [73–75] przebadano nanourządzenie trójelektrodowe, stanowiące prototyp tranzystora jednoelektronowego [6].

W ostatnim czasie ukazała się seria prac [76–79], w których badano nanostruktury wieloelektrodowe nie posiadające symetrii, zbudowane z GaAs i jego stopów.

W pracach [80–82] zbadano nanostruktury oparte na krzemie (struktury MOS).

1.4 Układ pracy.

W rozdziale drugim przedstawimy teorię nanourządzeń dwuelektrodowych posiadających symetrię cylindryczną. W szczególności przedstawimy numeryczny sposób rozwiązania równania Poissona, samouzgodnienie problemu Poissona-Schrödingera oraz problem warunków brzegowych.

Obliczenia wykonamy dla nanostruktury dwuelektrodowej [83], która została skonstruowana i przebadana eksperymentalnie przez zespół pod kierownictwem R. C. Ashoori'ego z Massachusetts Institute of Technology (MIT).

Zespół ten zbudował, a następnie przebadał szereg podobnych konstrukcji [37–40].

W rozdziale trzecim uzupełnimy teorię z rozdziału drugiego o możliwość badania nanourządzeń posiadających dowolny układ elektrod i nie posiadających żadnej symetrii. Zbadamy nanostrukturę wieloelektrodową [47], wytworzoną i przebadaną eksperymentalnie przez zespół pod kierownictwem L. Kouwenhovena z Uniwersytetu Technicznego w Delft. Jest to konstrukcja reprezentatywna dla serii wieloelektrodowych struktur planarnych [33, 41–53]. Dodatkowym utrudnieniem, które musimy uwzględnić w tych rachunkach jest pole magnetyczne, ponieważ wszystkie pomiary były wykonywane w jego obecności.

W rozdziale czwartym wykorzystamy teorię opracowaną w rozdziale trzecim do badania zjawiska autolokalizacji elektronu w sąsiedztwie uziemionej elektrody [84]. Obliczenia wykonamy dla nanourządzenia zawierającego studnię kwantową oraz jedną, nieskończenie długą, ale o skończonej szerokości elektrodę (ścieżkę prądową).

Odpowiemy na pytanie, gdzie lokalizuje się elektron? Czy poniżej środka ścieżki, czy przy krawędzi. Przebadamy rozkłady ładunku i energii potencjalnej w nanourządzeniu.

W Dodatku opiszemy dwie dokładne metody diagonalizacji hamiltonianu. Pierwsza to metoda czasu urojonego stosowana w problemach jednoelektronowych. Drugą jest metoda mieszania konfiguracji [85], w układach nie posiadających wysokiej symetrii, zastosowana do dokładnego opisu układów 2, 3 i 4 elektronowych.

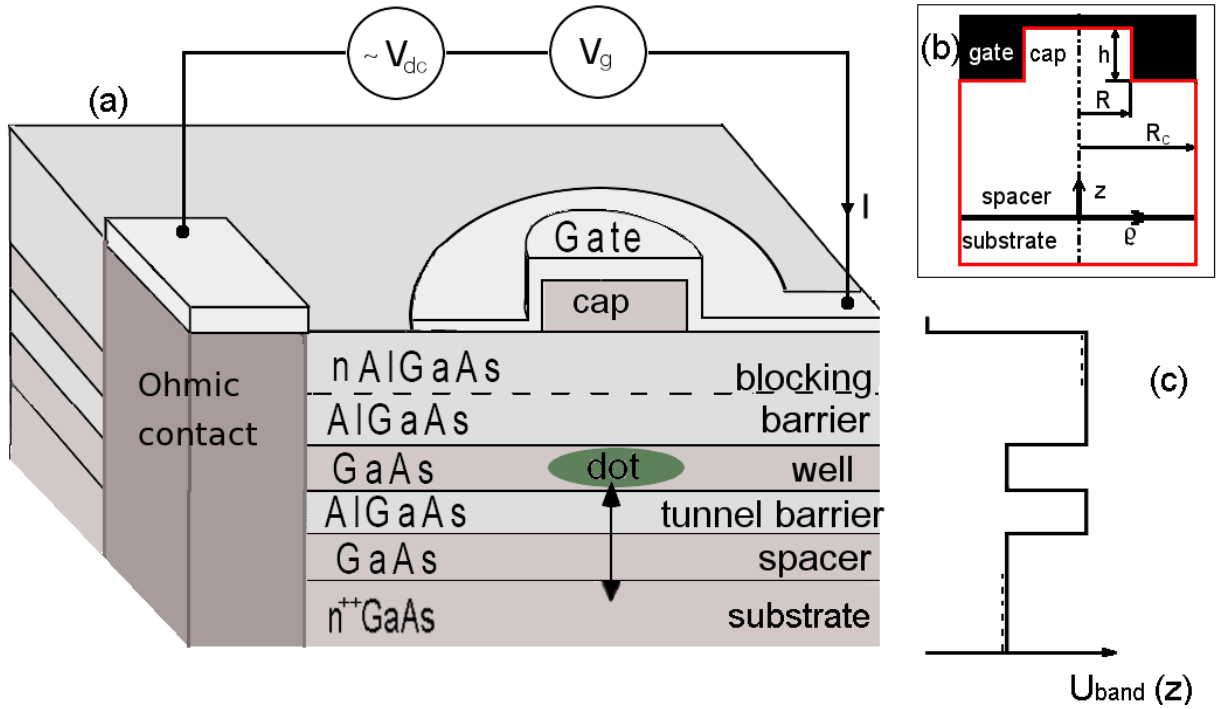
Rozdział 2

Urządzenie dwuelektrodowe posiadające symetrię cylindryczną.

Przedmiotem obliczeń zaprezentowanych w tym rozdziale jest rozkład potencjału elektrostatycznego w nanourządzeniach, w których zespół R. Ashooriego z MIT badał eksperymentalnie własności kropek kwantowych [37–40,83]. Schemat takiego nanourządzenia przedstawiony jest na rys. 2.1. Nanourządzenie to ma planarną strukturę i składa się z na przemian nałożonych na siebie domieszkowanych i niedomieszkowanych warstw półprzewodnika GaAs i AlGaAs. Podłoże z GaAs o grubości 300 nm jest silnie domieszkowane donorami i połączone z złączem omowym.

Dalsze warstwy są nałożone na podłoże w następującej kolejności: bufor z GaAs o grubości 60 nm, 12.5 nm bariera tunelowa z AlGaAs, obszar studni kwantowej o grubości 17.5 nm z GaAs oraz 50 nm bariera blokująca z AlGaAs. W barierze blokującej w pracach [37–40,83] zastosowano domieszkowanie typu δ lub rozłożono domieszki donorowe równomiernie w warstwie o grubości 35 nm stanowiącej górną część bariery. Na domieszkowaną donorami warstwę AlGaAs nałożony jest kapturek z GaAs w kształcie walca o wysokości $h = 30$ nm i promieniu podstawy R . Cała struktura jest pokryta metalem, który tworzy elektrodę górną - bramkę.

Pomiędzy bramką i kontakt omowy przyłożone jest ujemne napięcie stałe V_g modulowane składową zmienną V_{dc} o bardzo małej amplitudzie. Napięcie zmienne używane jest w procesie pomiaru pojemności kropki metodą spektroskopii pojemnościowej. Napięcie stałe jest źródłem niejednorodnego pola elektrostatycznego, które w studni kwantowej z GaAs w obszarze poniżej kapturek tworzy potencjał uwięzienia dla elektronów w płaszczyźnie xy . Ograniczenie ruchu elektronów w kierunku z wynika z różnicy poziomów dna pasma przewodnictwa GaAs/AlGaAs.



Rys. 2.1: (a) schemat nanourządzenia z zaznaczonymi elektrodami, układem warstw i miejscem, w którym generuje się kropka kwantowa. Strzałką zaznaczono kanał, którym elektron przechodzi z podłoża do kropki lub z kropki do podłoża. (b) schematyczny przekrój przez nanourządzenie. Zamieszczono oznaczenia rozmiarów wybranych elementów nanourządzenia: wysokości kapturka h oraz promienia jego podstawy R . Przedstawiono orientację układu współrzędnych, oraz przebieg powierzchni brzegowych otaczających obszar obliczeniowy (czerwona linia). Na te powierzchnie składa się powierzchnia górna i boczna kapturka oraz powierzchnia walca o promieniu R_c . (c) położenia dna pasma przewodnictwa $U_{band}(z)$ dla $\varrho = R_c$. Linia przerywaną zaznaczono położenie poziomów donorowych, znajdujących się 4.7 meV poniżej dna pasma przewodnictwa. Poziome donorowe w podłożowej warstwie GaAs wyznaczają energię Fermiego E_F .

2.1 Spektroskopia pojemnościowa.

Spektroskopia pojemnościowa jest eksperymentalną metodą badania elektronowych poziomów energetycznych w kropkach kwantowych. Metoda ta bazuje na pomiarze zmiany pojemności elektrostatycznej nanourządzenia spowodowanej wielokrotnym wchodzeniem do i wychodzeniem z kropki kwantowej pojedynczego elektronu. W pracy [83] przejścia stymulowane są okresowo zmiennym napięciem V_{dc} (ok. 30 kHz) o małej amplitudzie (ok. 3 mV).

Są one obserwowane jedynie w sytuacji, gdy w zależności od wartości zmiennego napięcia V_{dc} energia układu N -elektronowego w kropce będzie na przemian większa i mniejsza od energii Fermiego. Przy braku zewnętrznych pól w temperaturze 0 K energia Fermiego E_F całego nanourządzenia jest wyznaczana przez energię stanu podstawowego donorów w podłożu. W pracy przyjęliśmy E_F jako energię odniesienia i przypisaliśmy jej wartość $E_F = 0$.

Obserwację poziomów energetycznych w kropce kwantowej rozpoczyna się od opróżnienia kropki z elektronów przez przyłożenie niskiego (silnie ujemnego) napięcia V_g . Jeśli będzie podwyższać się składową stałą napięcia, to dla określonej jej wartości otrzyma się gwałtowne zwiększenie pojemności elektrostatycznej nanourządzenia, czyli pik pojemnościowy odpowiadający przejściu pierwszego elektronu do kropki. Kolejny N -ty pik pojemnościowy odpowiadać będzie przejściu N -tego elektronu.

2.2 Potencjał pola elektrostatycznego i jego źródła.

Całkowite pole elektrostatyczne w nanostrukturze jest generowane przez napięcie przyłożone pomiędzy elektrody, zjonizowane donory w warstwach domieszkowanych i elektrony uwięzione w kropce. Korzystając z zasady superpozycji rozdzielamy potencjał $\varphi_{tot}(\vec{r})$ całkowitego pola elektrostatycznego w nanostrukturze na dwie składowe, które pochodzą od różnych źródeł :

$$\varphi_{tot}(\vec{r}) = \varphi_{elst}(\vec{r}) + \varphi_{eqd}(\vec{r}) . \quad (2.1)$$

$\varphi_{eqd}(\vec{r})$ jest potencjałem pochodzącym od elektronów uwięzionych w kropce.

Wyznaczamy go całkując gęstość ładunku elektronów $\rho_{eqd}(\vec{r}_1)$:

$$\varphi_{eqd}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_{\Omega} d^3r_1 \frac{\rho_{eqd}(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|}, \quad (2.2)$$

gdzie Ω jest obszarem kropki i części barier.

$\varphi_{elst}(\vec{r})$ jest potencjałem pola elektrostatycznego, które jest generowane przez zjonizowane domieszki i ładunki indukowane na elektrodach a jego niejednorodność poniżej kapturka stanowi potencjał uwięzienia bocznego dla elektronów w kropce kwantowej. Potencjał $\varphi_{elst}(\vec{r})$ stanowi przedmiot naszych badań, znajdujemy go rozwiązując równanie Poissona:

$$\nabla^2 \varphi_{elst}(\vec{r}) = -\frac{\rho_d(\vec{r})}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (2.3)$$

gdzie $\rho_d(\vec{r})$ jest gęstością ładunku zjonizowanych donorów w obszarze górnej części bariery blokującej AlGaAs i w warstwie domieszkowanej podłoża poniżej bufora.

Jonizacji ulegają donory położone w miejscach, w których energia potencjalna elektronu liczona względem podłoża jest większa od energii wiązania donora. Ponieważ za potencjał odniesienia przyjmujemy w rachunku potencjał podłoża, energia potencjalna elektronu wyniesie:

$$U_{tot}(\vec{r}) = -|e|\varphi_{tot}(\vec{r}) + U_{band}(\vec{r}), \quad (2.4)$$

gdzie $U_{band}(\vec{r})$ jest wartością energii potencjalnej elektronu wynikającą z przesunięcia dna pasma przewodnictwa w danym materiale (rys. 2.1c), a $\varphi_{tot}(\vec{r})$ oznacza całkowity potencjał elektrostatyczny dany wyrażeniem (2.1). Warunek na rozkład gęstości zjonizowanych donorów przyjmie postać:

$$\rho_d(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{gdym } U_{tot}(\vec{r}) < E^D \\ |e|n_d(\vec{r}) & \text{gdym } U_{tot}(\vec{r}) > E^D \end{cases}, \quad (2.5)$$

gdzie $n_d(\vec{r})$ stanowi rozkład gęstości wprowadzonych domieszek donorowych, a E^D stanowi energię elektronu związanego na dodatnim centrum donorowym, leży ona 4.7 meV poniżej dna pasma przewodnictwa GaAs. Zgodnie z przyjętym przez nas poziomem odniesienia $E^D = E_F = 0$.

Założenie jednorodnego (ciągłego) rozkładu ładunku donorów jest możliwe dzięki obecności niedomieszkowanych warstw buforowych – dolnej i górnej, które powodują, że potencjał pochodzący od wielu punktowych źródeł uśrednia się w studni kwantowej.

2.3 Procedura numeryczna wyznaczania potencjału.

Rozważana struktura posiada symetrię osiową, zatem rozkład potencjału elektrostatycznego zapisać można we współrzędnych cylindrycznych, dzięki czemu opis sprowadzimy do dwóch zmiennych (ϱ, z) . Równanie Poissona (2.3) w tych współrzędnych przyjmie postać:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \varrho^2} + \frac{1}{\varrho} \frac{\partial}{\partial \varrho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi_{elst}(\varrho, z) + \frac{\rho_d(\varrho, z)}{\varepsilon \varepsilon_0} = 0. \quad (2.6)$$

Równanie to rozwiązujemy iteracyjną metodą nadrelaksacji. Jest to metoda różnicowa, przy pomocy której wyznaczamy wartości potencjału na siatce. Używamy siatki o stałych odległościach międzywęzłowych, które wynoszą: w kierunku z - $\Delta_z = 2$ nm, w kierunku ϱ przyjmowaliśmy Δ_ϱ w zakresie od 2 nm dla małych promieni kapturków ($R < 80$ nm) do 10 nm (dla $R > 500$ nm). Stosowanie siatki o węzłach równoodległych dla funkcji gładkich pozwala uzyskać przy pomocy trójpunktowego ilorazu różnicowego dokładność aproksymacji pochodnych rzędu $O(\Delta^2)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x)}{\partial x} &= \frac{f(x + \Delta_x) - f(x - \Delta_x)}{2\Delta_x} + O(\Delta_x^2) \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} &= \frac{f(x + \Delta_x) + f(x - \Delta_x) - 2f(x)}{\Delta_x^2} + O(\Delta_x^2). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Po zastąpieniu pochodnych w równaniu (2.6) odpowiednimi ilorazami różnicowymi otrzymamy:

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_{elst}(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) + \varphi_{elst}(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i) - 2\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i)}{\Delta_\varrho^2} \\ & + \frac{1}{\varrho_i} \frac{\varphi_{elst}(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) - \varphi_{elst}(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i)}{2\Delta_\varrho} \\ & + \frac{\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i + \Delta_z) + \varphi_{elst}(\varrho_i, z_i - \Delta_z) - 2\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i)}{\Delta_z^2} + \frac{\rho_d(\varrho_i, z_i)}{\varepsilon \varepsilon_0} = 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Równanie (2.8) stanowi związek pomiędzy gęstością ładunku i wartością potencjału w punkcie centralnym oraz wartościami potencjału w czterech sąsiednich punktach. Przegrupujemy wyrazy w równaniu tak, aby wyrazić potencjał w punkcie centralnym przez pozostałe wielkości:

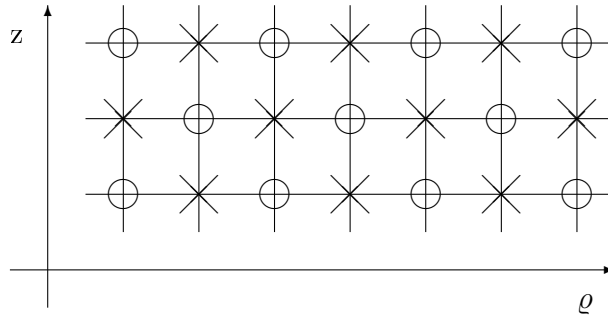
$$\begin{aligned}
\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i) &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\Delta_\varrho^2} + \frac{1}{\Delta_z^2} \right]^{-1} \cdot \left[\frac{\varphi_{elst}(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) + \varphi_{elst}(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i)}{\Delta_\varrho^2} \right. \\
&+ \frac{1}{\varrho_i} \frac{\varphi_{elst}(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) - \varphi_{elst}(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i)}{2\Delta_\varrho} \\
&\left. + \frac{\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i + \Delta_z) + \varphi_{elst}(\varrho_i, z_i - \Delta_z)}{\Delta_z^2} + \frac{\rho_d(\varrho_i, z_i)}{\varepsilon\varepsilon_0} \right].
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Wyrażenie to zostanie wykorzystane do iteracyjnego wyliczenia potencjału:

$$\begin{aligned}
\varphi_{elst}^{n+1}(\varrho_i, z_i) &= (1 - w)\varphi_{elst}^n(\varrho_i, z_i) + w \left[\frac{1}{\Delta_\varrho^2} + \frac{1}{\Delta_z^2} \right]^{-1} \cdot \\
&\cdot \left[\frac{\varphi_{elst}^n(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) + \varphi_{elst}^n(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i)}{\Delta_\varrho^2} + \frac{1}{\varrho_i} \frac{\varphi_{elst}^n(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) - \varphi_{elst}^n(\varrho_i - \Delta_\varrho, z_i)}{2\Delta_\varrho} \right. \\
&\left. + \frac{\varphi_{elst}^n(\varrho_i, z_i + \Delta_z) + \varphi_{elst}^n(\varrho_i, z_i - \Delta_z)}{\Delta_z^2} + \frac{\rho_d^n(\varrho_i, z_i)}{\varepsilon\varepsilon_0} \right],
\end{aligned} \tag{2.10}$$

gdzie w oznacza wagę, którą dobieramy tak, aby zoptymalizować zbieżność procedury iteracyjnej.

Rozkład potencjału liczymy przebiegając siatkę punktów w przestrzeni kolejno w kierunkach ϱ i z . Podczas pojedynczej iteracji wartość funkcji $\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i)$ modyfikujemy dwustopniowo (rys. 2.2), najpierw w węzłach oznaczonych krzyżami, następnie w węzłach zaznaczonych okręgami. Zabieg ten zwiększa stabilność procedury iteracyjnej.



Rys. 2.2: Kolejności obliczeń na węzłach siatki.

W wyrażeniu (2.10) znajduje się wyraz zawierający $\frac{1}{\varrho}$, dlatego nie możemy użyć tego wyrażenia do wyznaczenia potencjału na osi symetrii $\varphi_{elst}^n(0, z)$.

Możemy skorzystać natomiast z faktu, że dla $\varrho = 0$ pochodna funkcji $\varphi_{elst}(\varrho, z)$ po ϱ musi się zerować:

$$\left. \frac{\partial \varphi_{elst}(\varrho, z)}{\partial \varrho} \right|_{\varrho \rightarrow 0^+} = 0. \quad (2.11)$$

Aproksymację pochodnej prawostronnej na siatce:

$$\frac{\partial \varphi_{elst}(\varrho, z)}{\partial \varrho^+} = \frac{4\varphi_{elst}(\varrho_i + \Delta_\varrho, z_i) - 3\varphi_{elst}(\varrho_i, z_i) - \varphi_{elst}(\varrho_i + 2\Delta_\varrho, z_i)}{2\Delta_\varrho} + O(\Delta_\varrho^2) \quad (2.12)$$

użyjemy do warunku (2.11) aby uzyskać formułę do procedury iteracyjnej:

$$\varphi_{elst}^{n+1}(0, z_i) = \frac{1}{3} [4\varphi_{elst}^n(\Delta_\varrho, z_i) - \varphi_{elst}^n(2\Delta_\varrho, z_i)]. \quad (2.13)$$

2.4 Warunki brzegowe dla rozwiązania równania Poissona.

Wyznaczając φ_{elst} z równania Poissona nakładamy na rozwiązanie warunek brzegowy na powierzchni otaczającej interesujący nas obszar, zaznaczony schematycznie na rys. 2.1.b linią czerwoną. Obszar ten ma postać cylindra z nałożonym kapturkiem. Na powierzchniach górnej metalowej elektrody - bramki oraz dolnej elektrody - podłoża, wartość całkowitego potencjału φ_{tot} jest ustalana w eksperymencie przez przyłożone napięcia [86]:

$$\varphi_{tot}(\vec{r}_{elektroda}) = V_g + U_{sch}, \quad (2.14)$$

gdzie U_{sch} jest wysokością bariery Schottky'ego.

Zależność na φ_{elst} wyznaczamy korzystając z równania (2.1):

$$\varphi_{elst}(\vec{r}_{elektroda}) = \varphi_{tot}(\vec{r}_{elektroda}) - \varphi_{eqd}(\vec{r}_{elektroda}). \quad (2.15)$$

Ta procedura pozwala uwzględnić w rachunku ładunek indukowany na elektrodach przez elektrony uwięzione w kropce kwantowej.

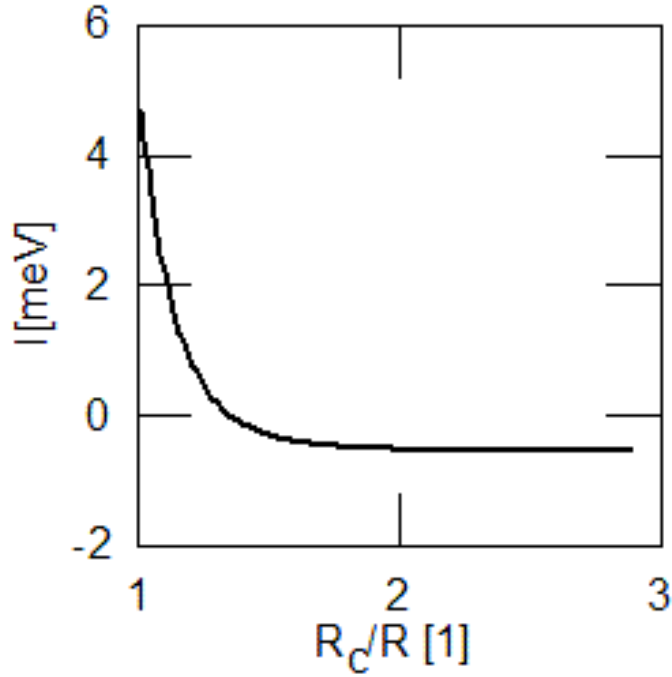
Na powierzchni bocznej cylindra przyjmujemy warunek brzegowy von Neumanna. Zakładając neutralność ładunkową struktury żądamy zerowania się normalnej do powierzchni składowej pola elektrycznego:

$$\vec{n} \cdot \vec{E} = 0. \quad (2.16)$$

Tę zależność stosujemy w każdej iteracji w postaci:

$$\varphi_{tot}^{n+1}(R_c, z) = \varphi_{tot}^n(R_c - \Delta_\varrho, z). \quad (2.17)$$

W rzeczywistości powyższy warunek brzegowy jest spełniony dla $R_c \rightarrow \infty$, postawienie go w skończonej odległości od kropki kwantowej może prowadzić do zafałszowania przebiegu potencjału. Musimy zatem przyjąć taką wielkość pudła obliczeniowego, aby niedokładność wyznaczenia wartości potencjału w centrum struktury spowodowana przybliżonym charakterem warunku brzegowego była do pominięcia. Przeprowadzono następujący rachunek testowy, mający na celu dobór wielkości obszaru obliczeń:



Rys. 2.3: Zależność funkcjonału I (2.18) od wielkości obszaru obliczeń R_c . Początkowa wielkość R_c jest nieco większa od promienia kapturka $R = 205 \text{ nm}$.

1. Przyjmujemy początkową wielkość obszaru R_c .
2. Wyznaczamy funkcję $\varphi_{elst}(\vec{r})$ na całym obszarze.
3. Wyznaczamy funkcjonał :

$$I = -\frac{|e|}{\Omega_{dot}} \int_{\Omega_{dot}} \varphi_{elst}(\vec{r}) d^3r. \quad (2.18)$$

4. Jeśli wraz ze zwiększaniem R_c funkcjonal I nie zmienia się kończymy procedurę, w przeciwnym wypadku zwiększamy R_c i przechodzimy do punktu 2.

Na rys. 2.2 zamieszczono zależność funkcjonału I od wielkości obszaru obliczeń R_c , dla struktury o promieniu kapturka $R = 205 \text{ nm}$. Dla małego obszaru obliczeń potencjał jest silnie uzależniony od R_c . Dla $R_c > 2R$ funkcjonal $I(R_c)$ jest stały, dalsze zwiększanie odległości brzegu od kropki kwantowej nie wpłynie na potencjał w kropce, możemy więc do rachunku właściwego użyć tej wartości R_c .

2.5 Samouzgodnienie pole-ładunek.

Występująca w równaniu (2.3) gęstość ładunku pochodzi od zjonizowanych donorów. Jej zależność od rozkładu potencjału dana jest wyrażeniem (2.5). W rezultacie zależy ona od rozkładu potencjału, który przy jej pomocy wyliczamy. Uwzględniliśmy ten fakt poprzez umieszczenie przy ρ w równaniu (2.10) indeksu n , który pozwala zmieniać rozkład gęstości ładunku w trakcie iteracji.

Drugi rodzaj ładunku występujący w nanourządzeniu - ładunek elektronów uwięzionych w kropce kwantowej wchodzi do równania Poissona poprzez warunek brzegowy. Jego rozkład gęstości znajdujemy rozwiązując kwantowy problem układu kilku elektronów w potencjale zewnętrznym $U_{conf}(\vec{r})$, który wydzielamy z potencjału $U_{tot}(\vec{r})$ odejmując od niego potencjał pochodzący od elektronów uwięzionych w kropce kwantowej $-|e|\varphi_{eqd}(\vec{r})$:

$$U_{conf}(\vec{r}) = U_{tot}(\vec{r}) + |e|\varphi_{eqd}(\vec{r}) = -|e|\varphi_{elst}(\vec{r}) + U_{band}(\vec{r}). \quad (2.19)$$

Rachunki te nawet w przypadku obecności tylko jednego elektronu w kropce kwantowej są czasochłonne i nie mogą być wykonywane w każdej iteracji. Wprowadzamy dla nich dodatkową pętlę iteracyjną. Rachunki iteracyjne prowadzimy do uzyskania samouzgodnienia rozkładu ładunku pochodzącego od obydwu źródeł i rozkładu potencjału elektrostatycznego. Postępujemy według schematu (rys 2.4):

1. Ustalamy napięcie przyłożone do elektrod i liczbę elektronów uwięzionych w kropce kwantowej. Narzucamy warunki brzegowe na potencjał całkowity φ_{tot} na elektrodzie.

2. Wprowadzamy warunki początkowe. Ich trafny wybór skraca istotnie czas obliczeń. We wszystkich punktach leżących poniżej kapturki przyjmujemy, że donory nie są zjonizowane, zaś w pozostałym obszarze przyjmujemy rozkład jonizacji wyznaczony analitycznie dla przypadku $\varrho \gg R$.

Rozkład gęstości ładunku N elektronów uwięzionych pomiędzy barierami przyjmujemy w postaci:

$$\rho_{eqd}(\varrho, z) = \begin{cases} \frac{Ne}{\pi^2 a^2 d} \exp\left(-\frac{\varrho^2}{a^2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2d}(z - z_0)\right) & ; \text{ gdy } |z - z_0| < \frac{d}{2} \\ 0 & ; \text{ gdy } |z - z_0| \geq \frac{d}{2} \end{cases}, \quad (2.20)$$

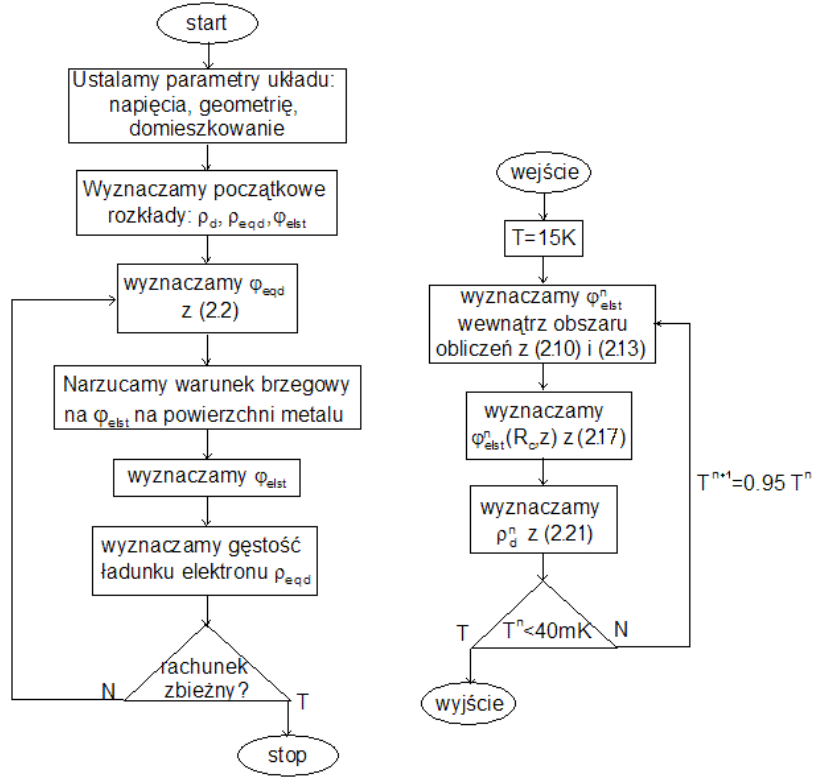
gdzie $d = 12.5$ nm jest szerokością studni kwantowej, $a = 30$ nm - rozmiarem gaussiana w kierunku ϱ , $z_0 = 80.75$ nm - środkiem studni kwantowej.

3. Według wzoru (2.2) liczymy potencjał $\varphi_{eqd}(\vec{r})$ pochodzący od ładunku uwięzionego w kropce. Korzystając z warunków brzegowych na $\varphi_{tot}(\vec{r})$, znajdujemy warunki brzegowe na $\varphi_{elst}(\vec{r})$ korzystając z równości (2.15).
4. Wykonujemy procedurę iteracyjną, w kolejnych krokach wyznaczając:
- (a) potencjał wewnątrz obszaru obliczeń zgodnie z (2.10), następnie (2.13)
 - (b) potencjał na brzegu z warunku (2.17)
 - (c) rozkład ładunku donorów z (2.5),

aż do uzyskania samouzgodnienia rozkładu potencjału elektrostatycznego z gęstością ładunku zjonizowanych donorów.

5. Rozwiązujemy problem własny układu N elektronów uwięzionych w kropce kwantowej utworzonej przez potencjał wyliczony w punkcie 4. Znajdujemy nowy rozkład gęstości elektronów w kropce i wracamy do punktu 3. Samouzgodnienie gęstości ładunku uwięzionych w kropce elektronów uzyskujemy bardzo szybko, zazwyczaj w kilku krokach iteracyjnych (3-5).

Procedura iteracyjna wykonywana w punkcie 4 przedstawionego schematu jest zazwyczaj bardzo wolno zbieżna. Wynika to stąd, że zmiany potencjału w danym punkcie powodują zmiany rozkładu zjonizowanych donorów, które wchodzi do następnej iteracji.



Rys. 2.4: Schemat algorytmu iteracyjnego służącego do wyznaczenia potencjału uwięzienia w nanourządzeniu. Z lewej strony przedstawiono blok zawierający pętlę samozgodnienia pole – ładunek elektronów w kropce. Z prawej zamieszczono schemat algorytmu wyznaczania φ_{elst} .

Powoduje to oscylacje, które zanikają tylko przy bardzo małych wagach, co spowalnia rachunki. W rezultacie uzyskanie samozgodnienia wymaga kilkudziesięciu tysięcy przebiegów całej siatki punktów.

Znaczną poprawę zbieżności uzyskuje się wprowadzając symulowane „schładzanie” układu. Pomiar, których wyniki staramy się odtworzyć wykonywane były w skrajnie niskich temperaturach (kilkadziesiąt mK). Rozkład obsadzeń stanów elektronowych jest praktycznie zero-jedynkowy (2.5). Jeżeli jednak wprowadzimy rozkład Fermiego Diraca dla temperatur skończonych, wtedy ulegną zmianie rozkłady ładunków zjonizowanych donorów. Rozkład gęstości zjonizowanych donorów przechodzi w:

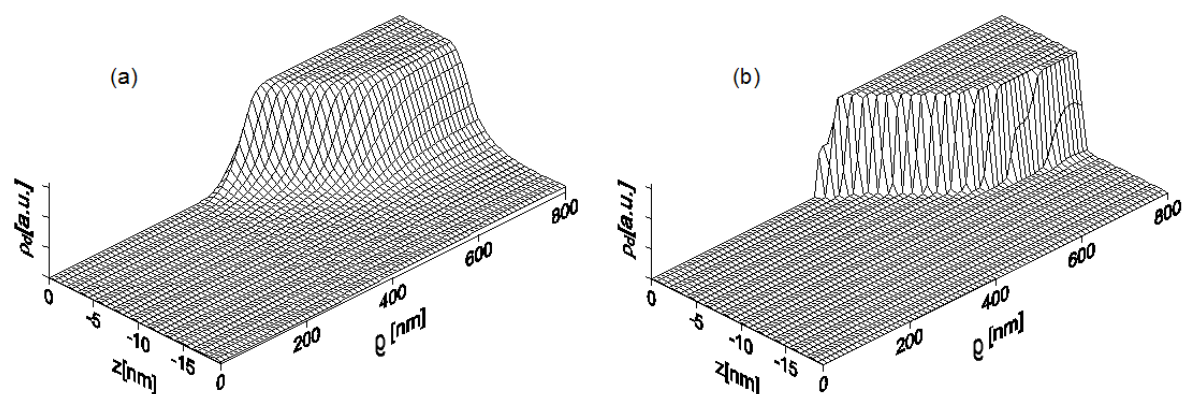
$$\rho_d(\vec{r}) = \frac{|e|n_d(\vec{r})}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E^D - U_{tot}(\vec{r})}{k_B T}\right)}. \quad (2.21)$$

W granicy $T \rightarrow 0$ rozkład ten przechodzi w rozkład dany wyrażeniem (2.5).

Procedurę iteracyjną zaczynamy zakładając temperaturę ok. $T = 15$ K, czyli znacznie większą od nominalnej, ale przy takiej temperaturze nie pojawiają się oscylacje rozkładów i zbieżność uzyskuje się bardzo szybko. Następnie w kolejnych krokach iteracyjnych obniżamy temperaturę do nominalnej.

Dzięki symulowanemu „schładzaniu” zbieżność uzyskuje się przy dwudziestokrotnie mniejszej liczbie iteracji.

Na rysunkach 2.5.a-b przedstawiono rozkłady ładunków w podłożu uzyskane dla wysokiej i niskiej temperatury. Granica pomiędzy obszarem zjonizowanych i niezjonizowanych donorów dla temperatur wysokich jest łagodna, a dla temperatur niskich bardzo ostra. W odróżnieniu od donorów znajdujących się w warstwie podłożowej, donory w warstwie blokującej ulegają całkowitej jonizacji. W tym obszarze gęstość ładunku $\rho_d(\vec{r}) = |e|n_d(\vec{r})$.

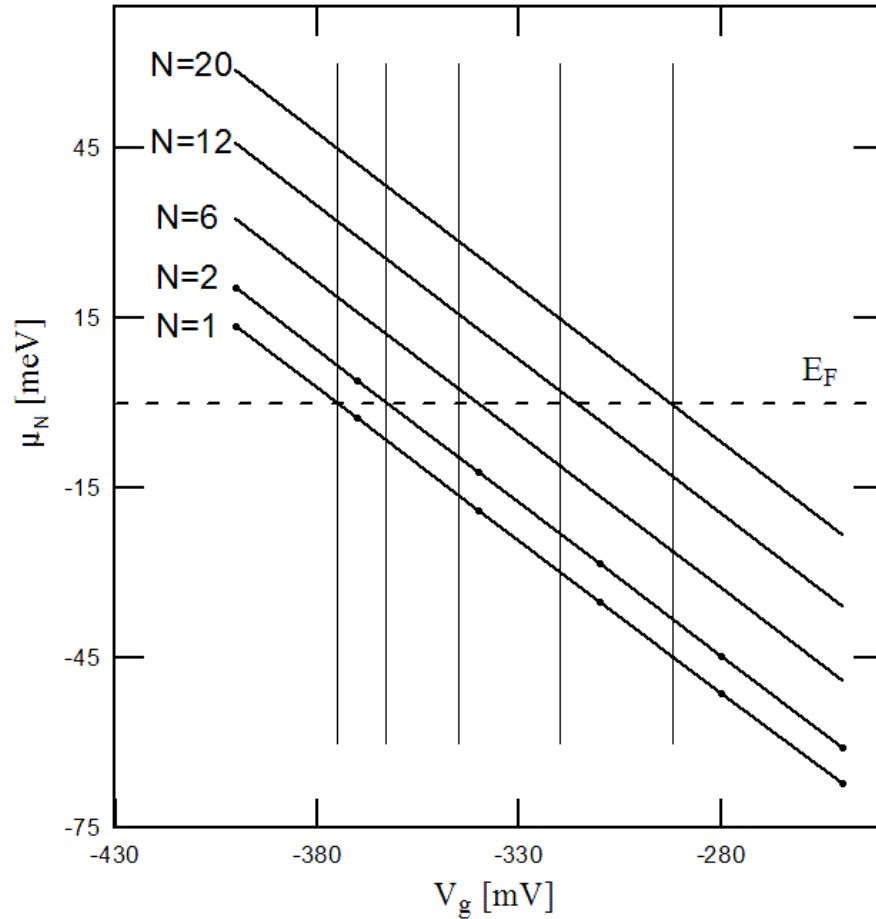


Rys. 2.5: Rozkład ładunku zjonizowanych donorów $\rho_d(\varrho, z)$ w podłożu, (a) w temperaturze $T = 15$ K, (b) w temperaturze 40 mK.

2.6 Odtworzenie wyników eksperymentalnych.

W obliczeniach przyjęliśmy szerokości warstw półprzewodnika i wysokość kapturka zgodnie z podanymi przez autorów eksperymentu, przesunięcie dna pasma przewodnictwa GaAs względem AlGaAs równe 220 meV, pozostałe dane materiałowe takie jak wysokość bariery Schottky’ego między bramką, a warstwą GaAs (0.65 meV), względną przenikalność dielektryczną (12.5) i masę efektywną (0.067) zgodnie z danymi literaturowymi dla GaAs [58].

Spośród parametrów opisujących nanostrukturę, dwa nie mogą być określone w eksperymencie z wystarczającą dokładnością. Jest to promień kapturka R oraz koncentracja n_d donorów w barierze blokującej. Promień kapturka nie może być precyzyjnie zmierzony, ponieważ w procesie technologicznym przykryty został metalową elektrodą, a w rachunku R oznacza promień cylindra wykonanego z GaAs. Trudność z określeniem koncentracji domieszek z kolei wynika z faktu, że proces ich rozmieszczania jest przypadkowy. Krzem może zajmować zarówno pozycję galu-glinu jak i arsenu. W zależności od tego, który pierwiastek został podmieniony otrzymamy domieszkę donorową lub akceptorową. W procesie technologicznym MBE, w którym wytworzono strukturę warstwową, stosunek donorów do wszystkich domieszek można zmieniać w zakresie 40% – 95% [62], w zależności od nieznanych nam warunków wytwarzania takich jak temperatura czy ciśnienie par.

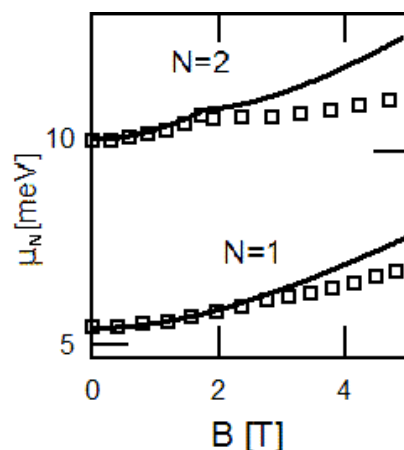


Rys. 2.6: Potencjał elektrochemiczny μ_N dla $N = 1, 2, 6, 12$ i 20 elektronów w funkcji napięcia V_g . Linią poziomą zaznaczono energię Fermiego, liniami pionowymi napięcia, dla których są obserwowane piki pojemnościowe w eksperymencie [83]

Oba niedokładnie wyznaczone parametry zostały w rachunku dobrane tak, by odtworzone były dane eksperymentalne. W rezultacie model zawiera dwa parametry dopasowania. Od promienia kapturka R zależy kształt potencjału uwięzienia, który z kolei wpływa na wartość energii oddzielającej poszczególne piki spektroskopii pojemnościowej, podczas gdy od koncentracji donorów n_d zależy wartość napięcia bramki, dla którego pierwszy elektron zostanie związany w kropce. Wartości R i n_d zostały dobrane tak, aby odtworzyć położenie dwóch pików pojemnościowych – pierwszego i dwudziestego, który jest jednym z ostatnich dobrze widzianych w eksperymencie. Ostatni pik został wybrany dlatego, żeby pomniejszyć znaczenie błędu wyznaczenia położenia pików wynikającego z zaniedbania w rachunku tzw. potencjału fluktuującego. Potencjał ten przesuwają lekko piki pojemnościowe, jego obecność jest wyraźnie widoczna w eksperymencie.

Na rysunku 2.6 przedstawiony jest sposób wyznaczania napięć przyłożonych do bramki, dla których wystąpią piki pojemnościowe. Ukośne linie oznaczają wartości tzw. potencjałów elektrochemicznych kropek kwantowych zawierających kolejno $N = 1, 2, 6, 12$ i 20 elektronów. Odpowiadają one kolejnym zamkniętym powłokom sztucznego atomu o symetrii cylindrycznej. Potencjał elektrochemiczny definiowany jest jako różnica energii całkowitej układów N i $N - 1$ elektronów: $\mu_N = E_N - E_{N-1}$, gdzie E_N jest energią stanu podstawowego układu N elektronów uwięzionych w kropce kwantowej. Energie E_N wyznaczyliśmy metodą Hartree-Focka. Linia przerywana na rysunku 2.6 przedstawia energię Fermiego E_F . Wyrównanie energii Fermiego z potencjałem elektrochemicznym określa warunki, dla których możliwe są przejścia N -tego elektronu do kropki i z powrotem. Punkty przecięcia wykresów odpowiadających potencjałom elektrochemicznym z prostą reprezentującą energię Fermiego wyznaczają napięcia bramki, dla których pojawiają się piki pojemnościowe. Linie pionowe na rysunku 2.6 zostały narysowane dla wartości napięć bramki odpowiadających eksperymentalnym pikom pojemnościowym. Widzimy, że położenia przedstawionych 5-ciu pików pojemnościowych są dobrze odtworzone.

Wyniki przedstawione na tym rysunku otrzymano dla $R = 205$ nm i $n_d = 4.62 \cdot 10^{17}$ cm⁻³, które odpowiada dwuwymiarowej koncentracji zjonizowanych donorów na poziomie $1.6 \cdot 10^{12}$ cm⁻² w warstwie o domieszkowaniu typu δ . Używając tak dobranych wartości obydwu parametrów wyliczyliśmy zależność położenia pierwszych dwóch pików pojemnościowych od pola magnetycznego. Odpowiadają one układom jedno- i dwu-elektronowym, dla których poziomy energetyczne mogą być wyznaczone dokładnie (bez korzystania z przybliżenia Hartree-Focka).



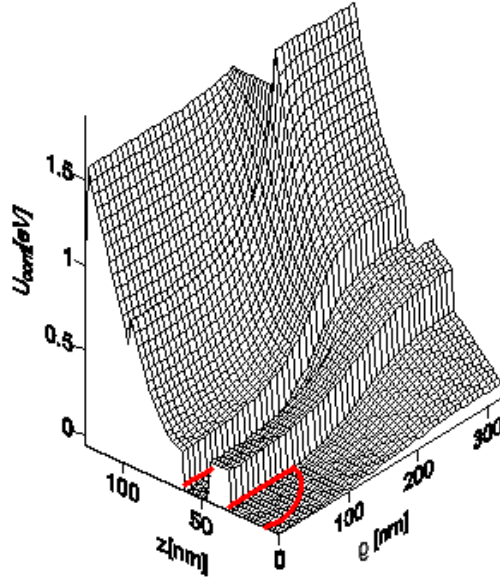
Rys. 2.7: Potencjał elektrochemiczny μ_N w funkcji pola magnetycznego dla jednego ($N=1$) i dwóch ($N=2$) elektronów. Wyznaczony przez nas numerycznie oznaczyliśmy liniami, eksperymentalny symbolami.

Krzywe ciągłe na rys. 2.7 przedstawiają wyznaczony numerycznie potencjał elektrochemiczny μ_N dla $N = 1$ i 2 . Na wykresie wyniki obliczeń porównywane są z danymi eksperymentalnymi, które zaznaczono kwadratami. Obliczenia dobrze odwzorowują wartość pola magnetycznego, dla którego pojawia się na wykresie „załamanie” wynikające z przejścia singlet-tryplet dla układu kropki kwantowej z dwoma elektronami. Ta zgodność oznacza, że kształt potencjału (energia oscylatora) jest wyznaczony poprawnie z równania Poissona. Dotychczasowa interpretacja wyniku eksperymentalnego bazująca na założeniu parabolicznego potencjału uwięzienia z energią oscylatora dobraną do energii stanu podstawowego układu jednoelektronowego $\hbar\omega_0 = 5.4$ meV daje przejście singlet-tryplet dla około 2-krotnie większego pola magnetycznego.

Dla dużych pól magnetycznych krzywa ciągła różni się od wartości eksperymentalnych, co wynika z zaniedbania w modelu niektórych dodatkowych efektów takich jak: potencjału fluktuującego lub zmiany wysokości bariery Schottkiego w polu magnetycznym.

2.7 Dwa obszary lokalizacji elektronu.

Na rys. 2.8 zamieszczono przebieg energii potencjalnej elektronu $U_{conf}(\varrho, z)$ w nanostrukturze, grubą czerwoną linią zaznaczono poziom Fermiego E_F . Na rysunku widać dwa obszary o energii mniejszej od zera – a więc dwa możliwe miejsca lokalizacji elektronu. Jedno znajduje się w studni kwantowej (w układzie podwójnej bariery), drugie w warstwie buforowej.



Rys. 2.8: Przebieg energii potencjalnej elektronu $U_{conf}(\rho, z)$ w nanourządzeniu. Czerwoną linią zaznaczono poziom Fermiego.

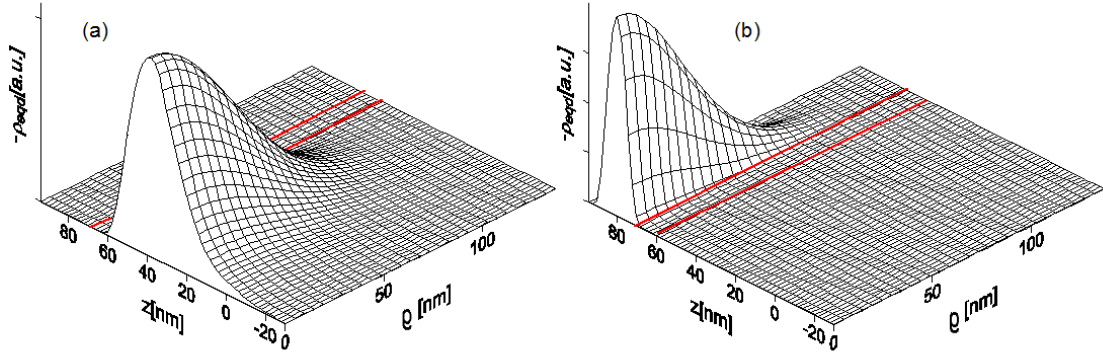
Nanourządzenia dyskutowane w pracach [37–40, 83] były konstruowane z myślą, żeby kropka generowała się w studni kwantowej.

Jednak dla struktury o dużym promieniu kapturka oraz odpowiednim napięciu pracy całkowita energia elektronu zlokalizowanego w warstwie buforowej jest niższa niż energia elektronu zlokalizowanego w układzie podwójnej bariery. Elektron będzie się zatem lokalizował w warstwie buforowej, tworząc bardzo rozległą kropkę kwantową, tak jak pokazano na rys. 2.9.a. Rozkład ten uzyskano dla struktury o promieniu kapturka 550 nm dla napięcia $V_g = 0.41$ V.

Elektron zlokalizowany w tej kropce może być przeniesiony z powrotem do podłoża przez zmniejszenie napięcia V_g . Związane jest to z „efektem dźwigni”, energia potencjalna w podłożu stanowiącym podstawę dźwigni wynosi zawsze zero, zaś „ramię” dźwigni umieszczone jest w elektrodzie.

Przy zwiększeniu napięcia V_g energia potencjalna w pobliżu metalowej elektrody zmieni się o wartość zmiany napięcia $|e|\Delta V_g$, w podłożu pozostanie stała i równa zero. Pomiedzy elektrodą a podłożem zmiana energii wyniesie ułamek $|e|\Delta V_g$.

Stosunek zmiany energii potencjalnej w kropce do zmiany napięcia przyłożonego do elektrody nazywany jest współczynnikiem konwersji. Współczynnik konwersji dla kropki w studni jest większy niż dla kropki w podłożu, gdyż studnia znajduje się bliżej elektrody, dlatego przy podwyższaniu ujemnego napięcia V_g elektron z podłoża przejdzie do studni (rys. 2.9.b).



Rys. 2.9: Rozkład ładunku elektronu w buforze (a) i w studni (b). Liniami czerwonymi zaznaczono położenie bariery tunelowej.

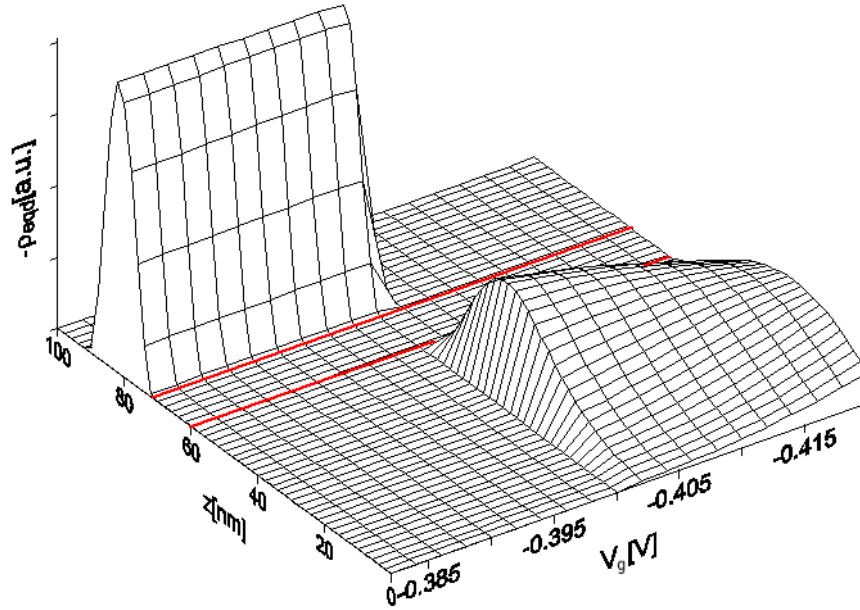
Przejście to jest bardzo gwałtowne, zachodzi przy zmianie napięć rzędu jednego mV. Łagodne przejście elektronu z podłoża do bufora, lub z podłoża do studni (rys. 2.10) wymaga zmiany napięcia rzędu 20 mV, co jest znacznie większą wartością niż amplituda napięcia zmiennego V_{dc} użytego w eksperymencie. Za powstanie piku pojemnościowego odpowiada zatem przejście elektronu pomiędzy kropkami.

Pokazaliśmy tylko jakościowy opis tego efektu, gdyż bezpośrednio bliskość silnie domieszkowanej warstwy podłożowej oraz bardzo łagodny przebieg potencjału elektrostatycznego sprawia, że elektrony w kropce leżącej w warstwie buforowej bardzo silnie odczuwają potencjał fluktuujący.

2.8 Kształt potencjału uwięzienia.

Rozważmy kropkę kwantową powstającą w studni. Energia $U_{conf}(\varrho) = U_{conf}(\varrho, z_0)$ stanowi potencjał uwięzienia bocznego dla z_0 ustalonego w studni kwantowej.

Zależność $U_{conf}(\varrho)$ od napięcia bramki V_g przedstawiono na kwazitrzójwymiarowym rysunku 2.11. Gruba ciągła linia odpowiada energii Fermiego przesuniętej o energię jednoelektronowego stanu podstawowego dla ruchu skwantowanego w kierunku z w studni kwantowej. Jak widać na rys. 2.11 potencjał uwięzienia bocznego może być przybliżony paraboliczną funkcją ϱ . Rosnące (ujemne) napięcie bramki obniża energię potencjalną elektronu. Prowadzi to do lokalizacji kolejnych elektronów w kropce, co powoduje skokowe obniżenie energii wiązania.



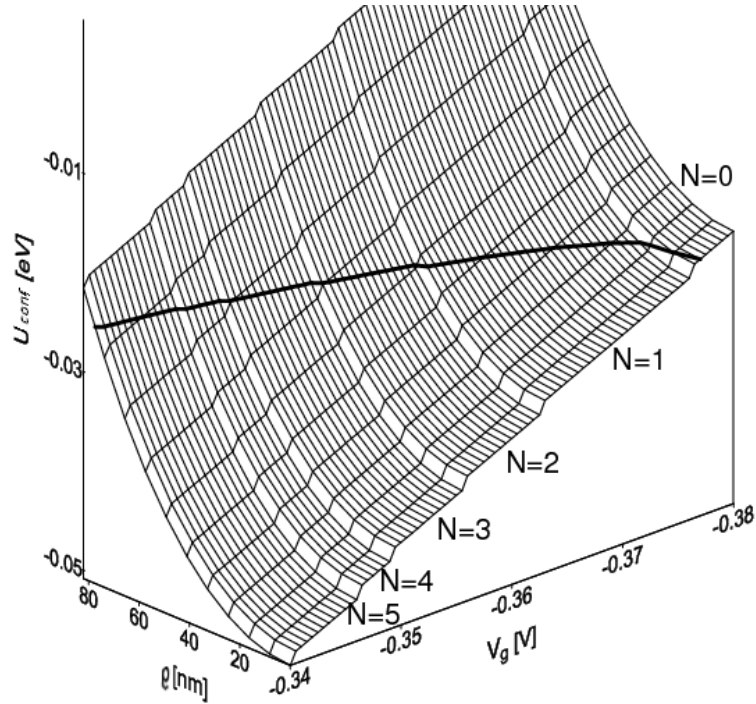
Rys. 2.10: Gęstość ładunku elektronu na osi symetrii ($\varrho = 0$) w funkcji napięcia przyłożonego do bramki.

Ten efekt jest spowodowany pojawieniem się ładunku indukowanego na elektrodach. Zmiana napięcia bramki praktycznie nie zmienia kształtu potencjału uwięzienia bocznego. Na kształt ten ma natomiast wpływ geometria poszczególnych elementów nanourządzenia. Największy wpływ ma promień kapturka R . Przebiegi potencjału uwięzienia bocznego dla wybranych promieni przedstawione są na rys. 2.12.a-2.12.d czarnymi kółkami. Na rysunkach tych przedstawione są również ich dopasowania funkcją eksponencjalno-wykładniczą (linie ciągłe) [87]:

$$U(\varrho) = -U_0 \exp[-(\varrho/L)^p]. \quad (2.22)$$

Na rysunku 2.12.a przedstawiliśmy energię potencjalną uwięzienia bocznego dla promienia kapturka $R = 205$ nm, którego wielkość dopasowaliśmy do danych eksperymentalnych w podrozdziale 2.6.

Linia przerywaną zaznaczyliśmy parabolę najlepiej dopasowaną do wartości potencjału przy osi. Parabola ta dobrze pasuje do przebiegu tylko dla $\varrho < 100$ nm. Dalszy zasięg paraboliczności uzyskaliśmy dla struktury o promieniu kapturka 120 nm, dla której przebieg $U_{conf}(\varrho)$ wraz z dopasowaniami przedstawiliśmy na rys. 2.12.d.



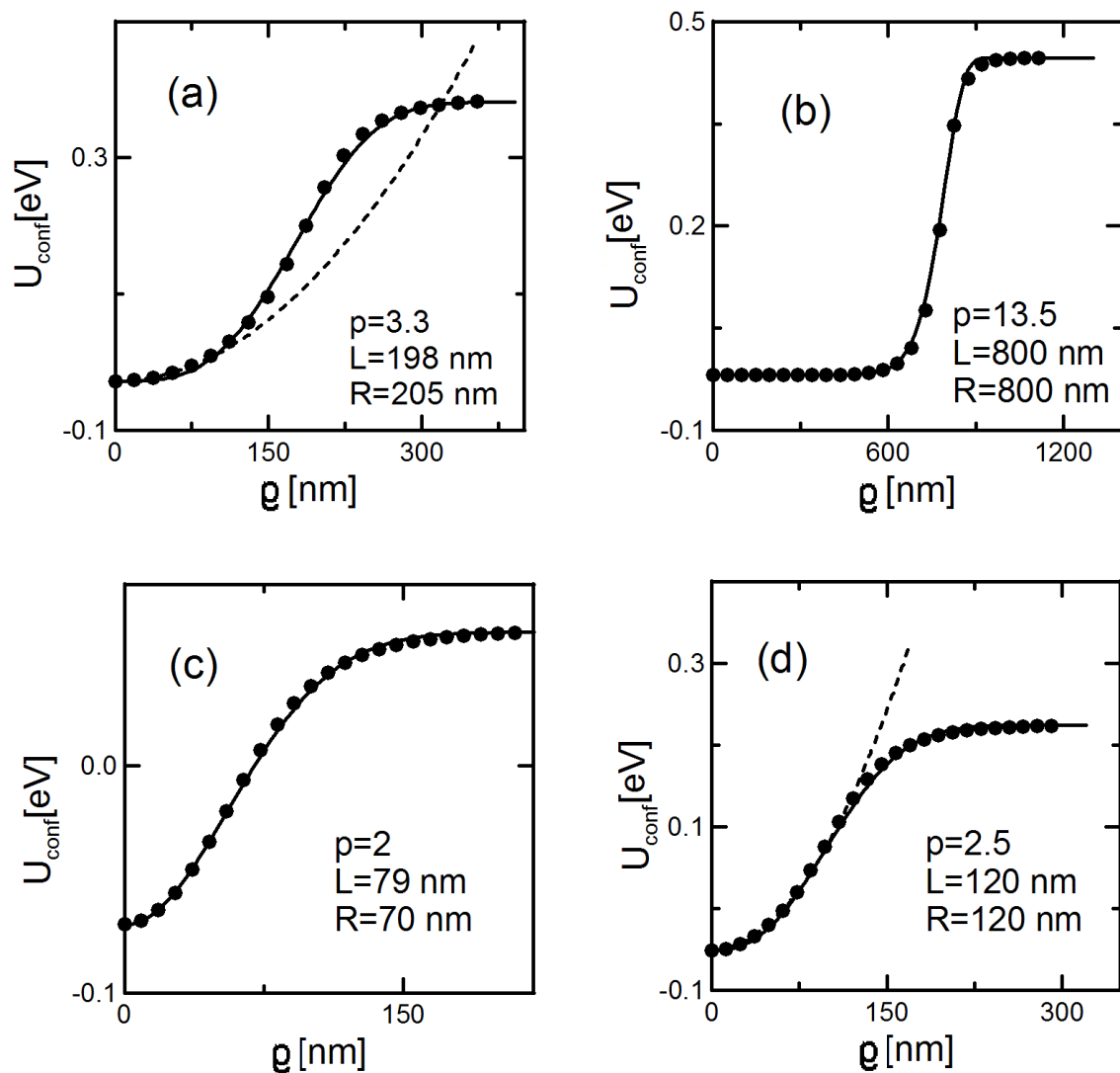
Rys. 2.11: Zależność energii potencjalnej uwięzienia bocznego od napięcia przyłożonego do bramki. Grubą linią zaznaczono położenie poziomu Fermiego przesuniętego o energię jednoelektronowego stanu podstawowego dla prostokątnej studni potencjału o szerokości 12.5 nm. Podano liczbę elektronów uwięzionych w kropce dla odpowiednich przedziałów napięć bramki. Promień kapturka jest ustalony i wynosi 205 nm.

Również dla tej struktury zasięg dobrego dopasowania jest ograniczony. Tej wady pozbawione są dopasowania funkcją (2.22), które bardzo dobrze odtwarzają przebiegi energii potencjalnej uwięzienia bocznego w całym obszarze poniżej bramki.

Szczególnym przypadkiem (2.22) jest funkcja Gaussa ($p = 2$), która stanowi najlepsze przybliżenie (2.22) dla małych promieni kapturka R . $U_{conf}(\rho)$, którego przebieg jest prawie idealnym gaussianem otrzymaliśmy dla $R = 70 \text{ nm}$ (rys. 2.12.c).

Zastosowanie modelowego potencjału w postaci funkcji Gaussa pozwala na uproszczenie obliczeń [69].

Dla dużych promieni kapturka przebieg $U_{conf}(\rho)$ zbliżony jest do prostokątnej studni potencjału (rys. 2.12.b). Płaskie dno tej studni sprawia, że istotny staje się fluktuujący potencjał pochodzący od zjonizowanych domieszek. Jego obecność powoduje, że elektrony będą lokalizować się w wielu przypadkowych minimach, potencjał ten w widmie spektroskopii pojemnościowej objawi się przypadkowym rozkładem linii.



Rys. 2.12: Przebieg energii potencjalnej uwięzienia bocznego (kółka) dla struktur o promieniu kapturka (a) $R = 205$ nm, (b) $R = 800$ nm, (c) $R = 70$ nm i (d) $R = 120$ nm. Liniami ciągłymi zaznaczyliśmy dopasowanie funkcją (2.22), liniami przerywanymi na (a) i (d) przybliżenie paraboliczne.

Przebiegi potencjałów 2.12.a,b,c,d były wyznaczone dla napięć V_g wynoszących odpowiednio -0.375 , -0.470 , $+0.100$ i -0.125 V. Napięcia te dobrano tak, żeby w kropce związany był jeden elektron.

Zauważmy, że parametr L z dopasowania (2.22) jest zbliżony do promienia kapturka R .

2.9 Optymalizacja parametrów nanourządzenia.

Pokazaliśmy już, że wyznaczony przez nas potencjał elektrostatyczny odtwarza eksperymentalne dane z pracy [83]. Możemy więc przebadać wpływ parametrów nanourządzenia na jego podstawowe własności fizyczne.

Rys. 2.11 i 2.12 pokazują, że potencjał uwięzienia bocznego może być przybliżony funkcją paraboliczną, jeśli promień kropki nie jest zbyt duży. Dzięki temu elektronowe własności kropek mogą być opisane za pomocą modelowego, parabolicznego potencjału uwięzienia. Jednak jak widzimy na rys. 2.12 obszar parabolicznego przebiegu jest ograniczony. Odstępstwo modelowego i prawdziwego przebiegu potencjału nie będzie miało znaczenia, gdy rozkład gęstości ładunku związanych elektronów będzie leżał w obszarze parabolicznego przebiegu potencjału.

Spójrzmy jak to wygląda w przypadku realnego nanourządzenia wykorzystanego w pracach [37–40, 83], dla którego przebieg potencjału zilustrowany jest na rys. 2.12.a. Na rys. 2.13 przedstawione są dwa przebiegi potencjału w centralnej części nanourządzenia, dla napięcia $V_g = -0.375$ V, przy którym w kropce wiąże się jeden elektron, oraz dla $V_g = -0.292$ V, przy którym w kropce wiąże się 20 elektronów. Rozkład gęstości ładunku elektronów w kropce zaznaczony jest liniami czerwonymi dla $N = 1$ i $N = 20$. Na rys. 2.13 krzyżyki odpowiadają rozwiązaniu numerycznemu równania Poissona (2.3) w węzłach siatki, a linie ciągła i kreskowana pokazują paraboliczne przybliżenia tych rozwiązań. Widzimy, że potencjał uwięzienia jest prawie paraboliczny w obszarze lokalizacji elektronów.

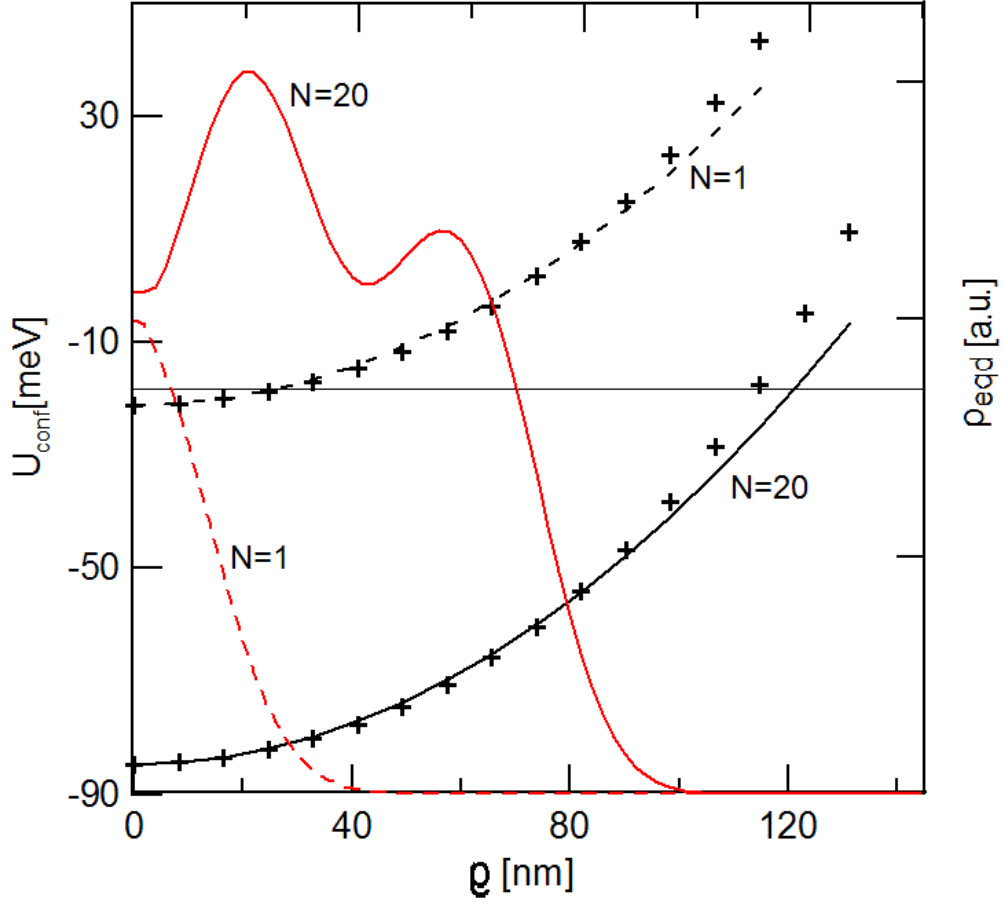
Zarówno pojedynczy elektron, jak i układ 20-elektronowy bardzo słabo penetrują obszar, w którym występuje odstępstwo potencjału od kształtu parabolicznego.

Paraboliczną energię potencjalną uwięzienia bocznego:

$$U(\varrho) = U_0 + m_e \frac{\omega_0^2}{2} \varrho^2 \quad (2.23)$$

charakteryzują dwa parametry: U_0 - wartość potencjału w minimum oraz ω_0 - określająca kształt potencjału uwięzienia blisko minimum. Kwant energii oscylatora tj. $\hbar\omega_0$ może być interpretowany jako energia wzbudzenia elektronu w kropce kwantowej.

Do opisu elektronowych własności parabolicznej kropki kwantowej wystarczy znajomość wielkości U_0 i $\hbar\omega_0$. Wielkości te z kolei są uzależnione od napięcia V_g , ilości elektronów w kropce i parametrów nanourządzenia np. domieszkowania lub promienia kapturka.

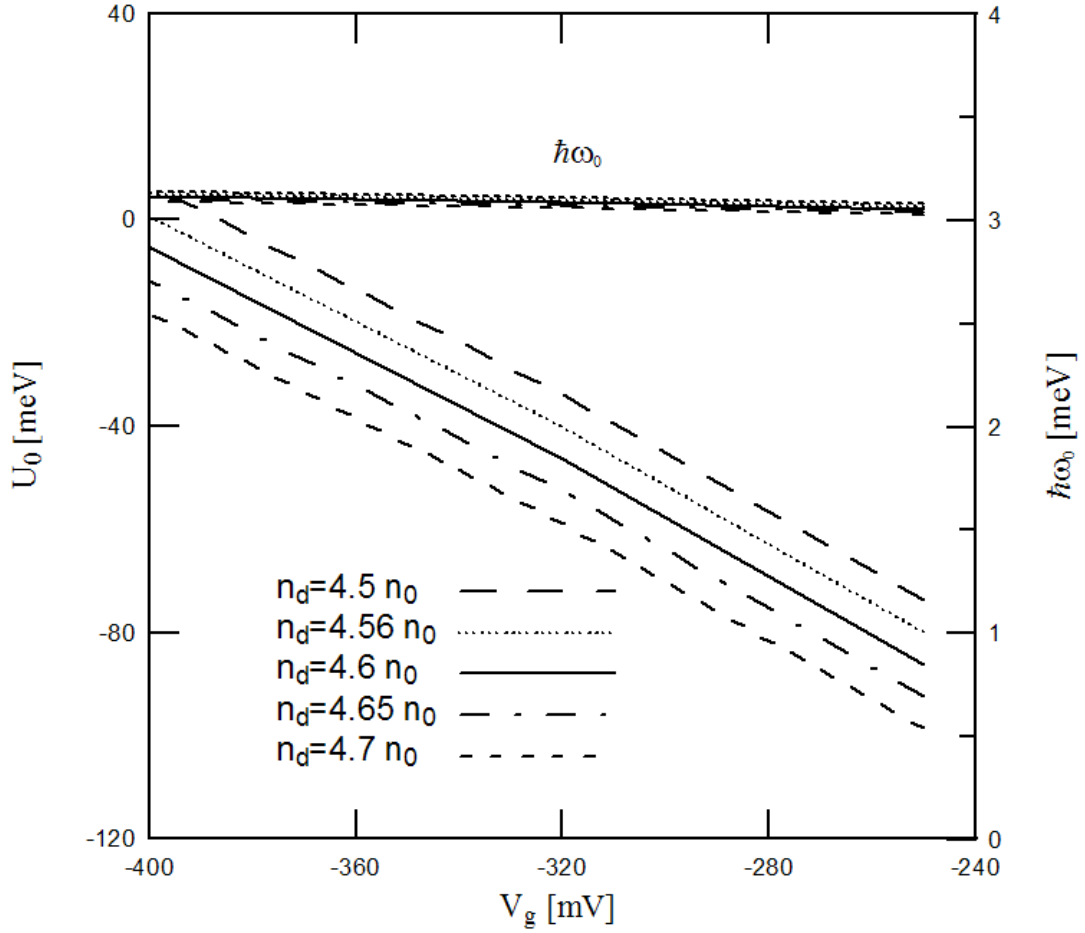


Rys. 2.13: Przebieg energii potencjalnej uwięzienia bocznego (krzyżyki) oraz ich dopasowania (linie czarne), w sytuacji gdy lokalizuje się $N = 1$ i 20 elektronów. Poziomą linią zaznaczono energię Fermiego. Czerwonymi liniami zaznaczono radialny rozkład gęstości ładunku elektronów zlokalizowanych w kropce dla jednego i $N = 20$ elektronów.

Zależność U_0 i $\hbar\omega_0$ od napięcia bramki przedstawiona jest na rys. 2.14. $\hbar\omega_0$ bardzo słabo rośnie wraz z wzrostem napięcia na bramce, natomiast dno studni potencjału U_0 obniża się liniowo wraz ze wzrostem V_g , co oznacza, że współczynnik konwersji jest w przybliżeniu stały (równy ~ -0.5 meV/mV). Stałość czynnika konwersji wynika z prostej budowy urządzenia, przypominającej kondensator płaski.

Na rys. 2.15 przedstawiliśmy zależność U_0 i $\hbar\omega_0$ od ilości elektronów zlokalizowanych w studni. Energia wiązania $\hbar\omega_0$ bardzo wolno rośnie, a dno studni potencjału U_0 opada liniowo wraz ze wzrostem ilości elektronów N uwięzionych w kropce kwantowej. Zależność ta jest spowodowana zmianą ładunku indukowanego na elektrodach, wynikającą z obecności ładunku w kropce.

Każdy dodatkowy elektron obniża położenie minimum potencjału o około 1 meV.

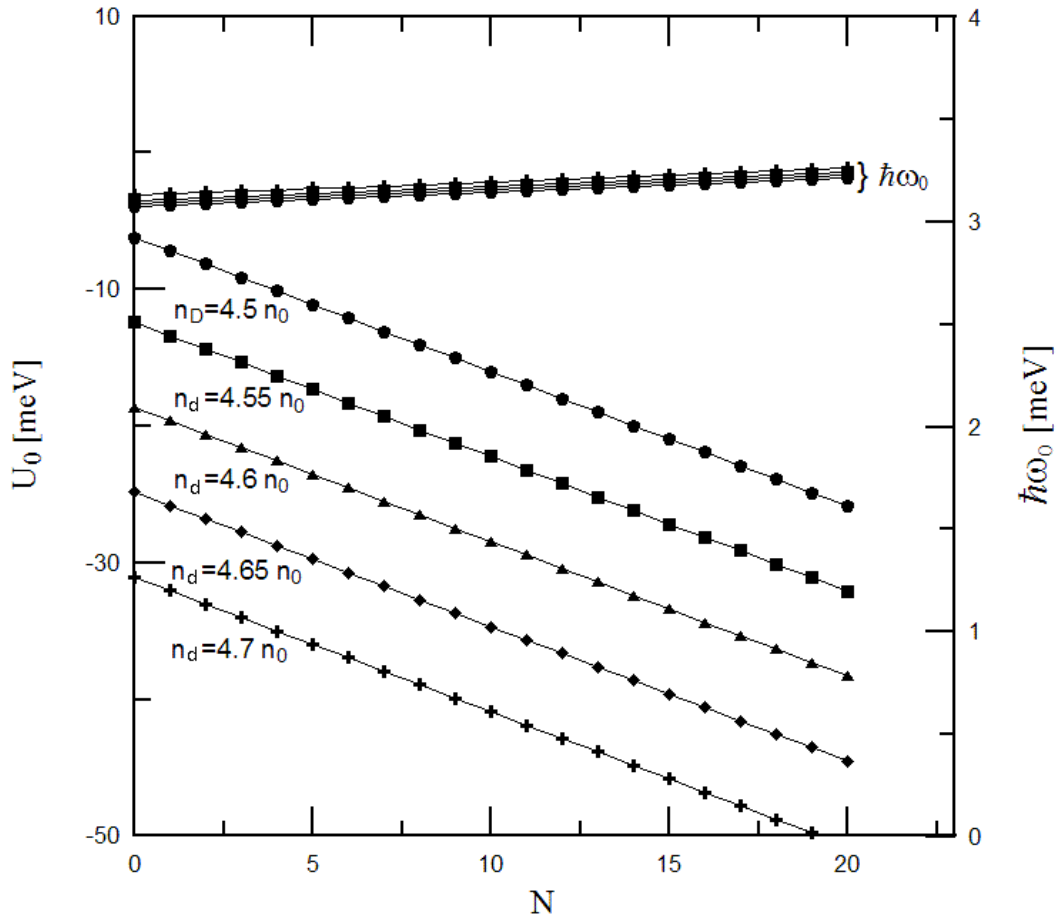


Rys. 2.14: Zależność $\hbar\omega_0$ oraz wartość potencjału w minimum U_0 od napięcia bramki V_g dla wybranych wartości domieszkowania n_d .

U_0 jest liniową funkcją N , gdyż ilość ładunku indukowanego jest wprost proporcjonalna do ilości elektronów w kropce. Z zależności U_0 od liczby elektronów związanych w kropce wynika ważna fizyczna własność nanourządzenia – okazuje się, że zwiększenie liczby elektronów powoduje pogłębienie potencjału. Efekt ten znacznie wpływa na elektronowe własności kropki. Jego dyskusja przedstawiona jest w pracy [84] oraz w rozdziale czwartym rozprawy.

Na rysunkach 2.14 i 2.15 widać również, że wzrost domieszkowania powoduje obniżenie liniowych funkcji $U_0(V_g)$, ale nie wpływa na ich nachylenie.

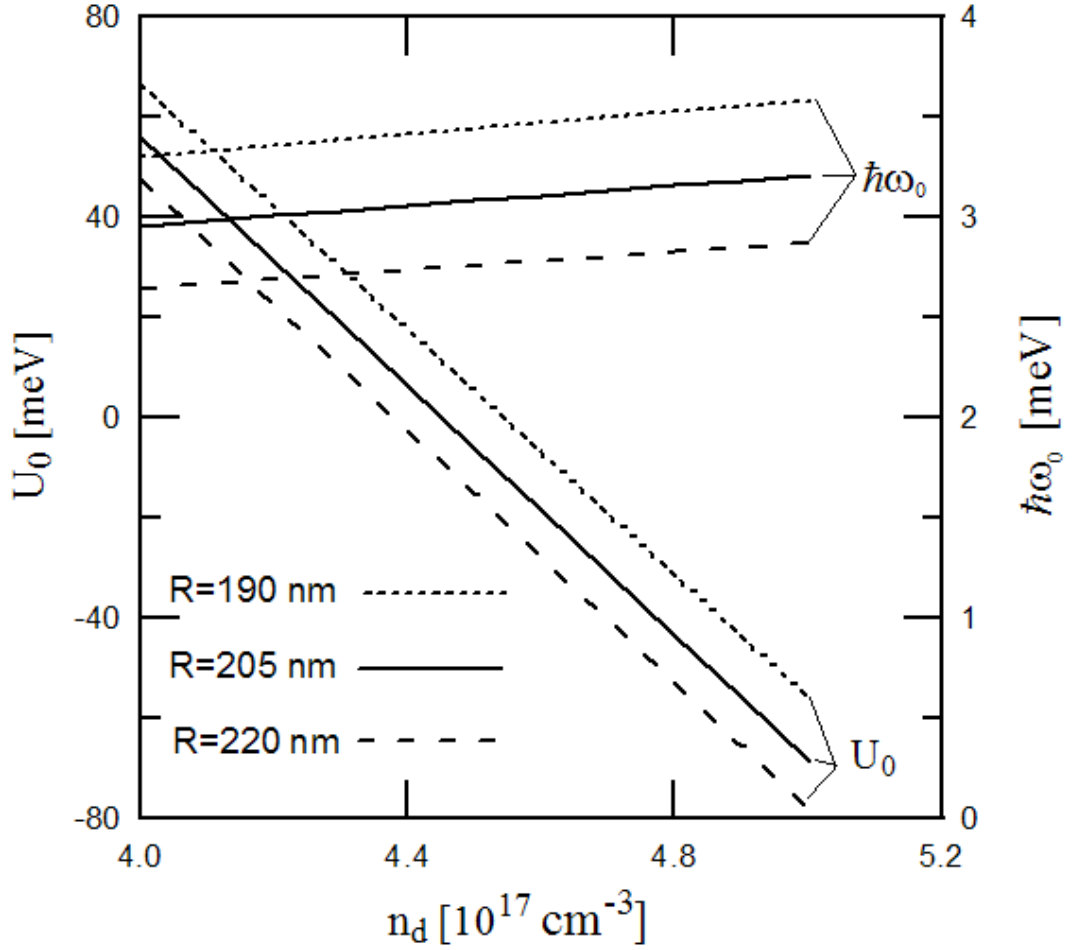
Na rys. 2.16 przedstawiona jest zależność U_0 i $\hbar\omega_0$ od koncentracji n_d zjonizowanych donorów dla trzech wartości promienia kapturka R . Jak widzimy energia wiązania $\hbar\omega_0$ jest prawie niezależna od n_d , a dno studni potencjału U_0 opada w dół, w przybliżeniu liniowo wraz ze wzrostem n_d .



Rys. 2.15: Zależność $\hbar\omega_0$ oraz wartość potencjału w minimum U_0 od ilości elektronów N dla wybranych wartości domieszkiowania n_d

Liniowa zależność U_0 i $\hbar\omega_0$ od koncentracji zjonizowanych donorów jest raczej nieoczekiwanym wynikiem.

W przeciwieństwie do liniowych zależności pokazanych na rys. 2.14-2.16 zależność wartości U_0 i $\hbar\omega_0$ od promienia kapturka R jest silnie nieliniowa (rys. 2.17). Wartość potencjału w minimum U_0 szybko opada wraz z R . Energia wzbudzenia oscylatora $\hbar\omega_0$ jest niemonotoniczną funkcją R , rośnie wraz ze wzrostem promienia dla $R < 65$ nm, przyjmuje maksimum dla $R = 65$ nm, następnie maleje wraz z wzrostem R . Interesujące jest to, że maksymalna wartość $\hbar\omega_0 = 6.9$ meV odpowiada potencjałowi uwięzienia bocznego o kształcie prawie idealnego Gaussianu (rys. 2.12.c).



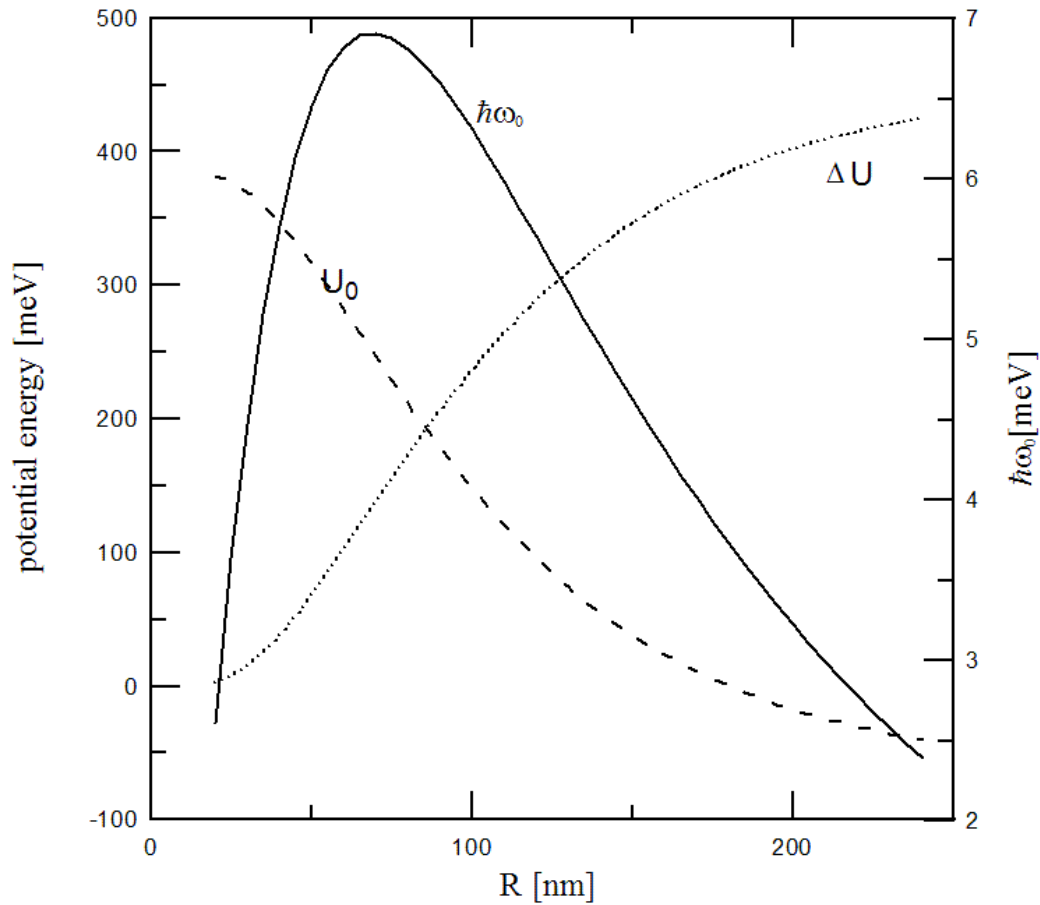
Rys. 2.16: Zależność $\hbar\omega_0$ oraz wartość potencjału w minimum U_0 od gęstości domieszkowania n_d dla wybranych wartości promienia kapturka R .

Rys. 2.17 przedstawia również wartość ΔU , która jest zdefiniowana jako:

$$\Delta U = U_{conf}(R_c, z_0) - U_{conf}(0, z_0), \quad (2.24)$$

gdzie R_c jest promieniem cylindrycznej powierzchni, która stanowi warunek brzegowy, a z_0 odpowiada granicy między studnią kwantową a barierą blokującą.

ΔU może być interpretowana jako głębokość jamy potencjału uwięzienia bocznego i jest odpowiedzialna za ograniczenie ruchu elektronów w płaszczyźnie poprzecznej. Głębokość jamy potencjału uwięzienia bocznego jest monotonicznie rosnącą funkcją R .



Rys. 2.17: Zależność $\hbar\omega_0$ (linia ciągła), wartości potencjału w minimum U_0 (linia przerywana) oraz głębokości studni potencjału ΔU (linia kropkowana) od promienia kapturka R .

2.10 Podsumowanie i wnioski.

Dobra zgodność wyniku obliczeń z danymi eksperymentalnymi pozwala uznać, że wszystkie istotne zjawiska fizyczne zostały uwzględnione poprawnie.

Dzięki ograniczonej liczbie stopni swobody w modelowanym urządzeniu możliwa była pełna dyskusja zależności potencjału uwięzienia od wszystkich istotnych parametrów struktury. Potencjał uwięzienia w decydującym stopniu zależał od dwóch parametrów - napięcia przyłożonego pomiędzy dwie elektrody oraz promienia kapturka. W nanourządzeniu generują się dwie kropki kwantowe, pierwsza w studni kwantowej, druga w warstwie buforowej. Przeniesienie elektronu z układu podwójnej kropki do podłoża wymaga dużej zmiany napięcia, w przeciwieństwie do przeniesienia elektronu z jednej kropki do drugiej. W rezultacie pik pojemnościowy obserwuje się wyłącznie przy przejściu elektronu przez barierę tunelową pomiędzy kropkami.

Zmieniając rozmiar kapturka można modelować kształt potencjału uwięzienia, który prowadzi do wymaganych elektronowych własności urządzenia. Promień kapturka R ma decydujący wpływ na energię wzbudzenia stanu jednoelektronowego. Zależność energii wzbudzenia od R jest silnie nieliniowa i posiada maksimum równe 6.9 meV dla $R = 65$ nm. Dla tej wartości promienia potencjał uwięzienia bocznego posiada przebieg gaussowski. Zwiększając promień można uzyskać przebiegi na znacznym obszarze bliskie paraboli, lub dla bardzo dużego kapturka potencjał z płaskim dnem bliskim prostokątnej studni. Na kształt potencjału uwięzienia natomiast nie ma wpływu przyłożone pomiędzy elektrody napięcie, koncentracja donorów i liczba elektronów związanych w kropce. Te trzy parametry mają wpływ jedynie na głębokość potencjału uwięzienia.

Głębokość potencjału uwięzienia w przeciwieństwie do jego kształtu może być regulowana po wytworzeniu nanourządzenia poprzez przyłożenie odpowiednich napięć pomiędzy elektrody. Przedstawione wyniki pokazują, że w tego typu kropkach współczynnik konwersji napięcie bramki - wartość energii potencjalnej w minimum jest stały.

Szczególnie ciekawym wynikiem jest zwiększanie głębokości jamy potencjału w funkcji liczby uwięzionych w kropce elektronów, którego przyczyną jest oddziaływanie z ładunkiem indukującym się na powierzchni metalu.

Prace nad kropkami [37–40, 83] dostarczyły nam wielu cennych wskazówek oraz narzędzi, dzięki którym mogliśmy podjąć trudne wyzwanie, jakim jest próba opisu układu o znacznie większym stopniu skomplikowania, czyli urządzenia wieloelektrodowego, opisanego w następnym rozdziale.

Rozdział 3

Urządzenie wieloelektrodowe.

Pośród wielu propozycji zbudowania nośnika informacji kwantowej – qubitów najbardziej obiecującym jest stan spinowy elektronu uwięzionego w kropce kwantowej.

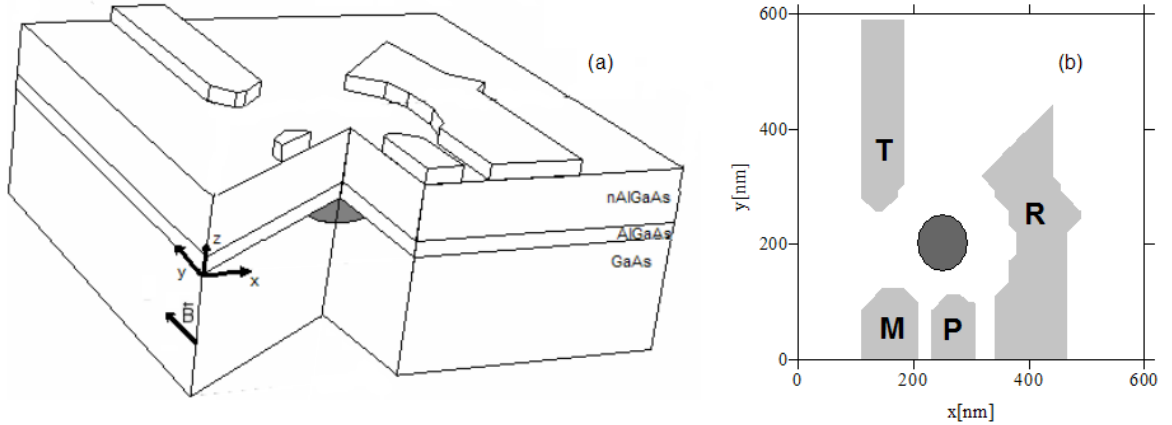
W tym kierunku idą badania grupy konstruktorów kropek kwantowych na uniwersytecie w Delft w Holandii. Aktualnie konstruowane i badane są pojedyncze i podwójne kropki kwantowe zbudowane na bazie planarnej struktury półprzewodnikowej, z ułożonymi na jej powierzchni odpowiednio wymodelowanymi metalowymi elektrodami. Jedną z takich konstrukcji jest nanourządzenie, w którym rozwiązano problem wykrywania obecności elektronu w kropce kwantowej [44]. Służyć ono ma do odczytu spinu elektronu [47]. To nanourządzenie stanowić będzie temat tego rozdziału.

Przebadany zostanie rozkład potencjału elektrostatycznego stanowiącego potencjał uwięzienia bocznego dla elektronów w wygenerowanej kropce kwantowej.

Na rysunku 3.1.a przedstawiono schemat, który przedstawia trójwymiarową strukturę rozważanego nanourządzenia, a na rysunku 3.1.b przedstawiono kształt i umiejscowienie na powierzchni struktury metalowych elektrod.

Sterowanie urządzeniem odbywa się przy pomocy napięć przyłożonych pomiędzy cztery elektrody (rys. 3.1.b), służące do kształtowania potencjału w kropce kwantowej i elektrodę podłożową, połączoną złączem omowym z warstwami półprzewodnikowymi. Poniżej elektrod ułożone są kolejno warstwy półprzewodnika: domieszkowana donorami nAlGaAs – będąca źródłem elektronów, niedomieszkowana AlGaAs spełniająca funkcję bufora, oraz warstwa GaAs, której granica z AlGaAs stanowi schodek potencjału, poniżej którego pojawi się kropka kwantowa.

Elektrony w stanach donorowych w AlGaAs znajdują się około 200 meV powyżej wolnych poziomów elektronowych na dnie pasma przewodnictwa GaAs. Opuszczają zatem stany donorowe lokalizując się tuż poniżej schodka.



Rys. 3.1: (a) quasi-trójwymiarowy schemat nanourządzenia przedstawionego w pracy [47]. Kolorem szarym zaznaczono obszar generowania się kropki kwantowej. Kartezjański układ współrzędnych (x, y, z) zorientowaliśmy tak jak na rysunku, oś z skierowano zgodnie z kierunkiem wzrostu warstw, oś y została zorientowana w kierunku pola magnetycznego $\vec{B} = (0, B, 0)$. Grubości poszczególnych warstw wynoszą: GaAs ponad $1 \mu\text{m}$, AlGaAs 20 nm, nAlGaAs 70 nm. (b) położenie i kształt metalowych elektrod ułożonych na powierzchni heterostruktury. Oznaczenia elektrod przyjęto za autorami pracy [47].

Ruch tych elektronów w kierunku prostopadłym do układu warstw ogranicza schodek potencjału w heterozłączeniu oraz pole elektrostatyczne wytwarzane przez dodatnie ładunki opuszczone przez elektrony jonów donorowych. Poniżej schodka potencjału pojawia się dwuwymiarowy gaz elektronowy (2DEG).

Obszary zawierające gaz elektronowy połączone są przy pomocy złącza omowego ze znajdującymi się w dużej ($> \mu\text{m}$) odległości od elektrod T , M , P i R elektrodami drenu i źródła, stanowiącymi elementy tzw. kontaktu punktowego [88,89], który służył w eksperymencie do kontroli ładunku uwięzionego w kropce. Różnica potencjałów przyłożona pomiędzy dren i źródło wynosząca 0.2 mV może być w naszych rachunkach zaniedbana, dlatego przyjęliśmy napięcia na obydwu elektrodach jako jeden poziom odniesienia. Przyjęliśmy za autorami artykułu [47] wartość potencjału na elektrodach drenu i źródła równą 0 V. Obszary źródła i drenu stanowią duże rezerwuary elektronów i wyznaczają energię Fermiego, która będzie stanowić energię odniesienia $E_F = 0$.

Nanourządzenie nie posiada żadnej symetrii, dlatego problem musi być rozwiązywany w przestrzeni jawnie trójwymiarowej. Rachunki wykonujemy w prostopadłościennym pudle obliczeniowym, które wybraliśmy w taki sposób, aby obejmowało obszar kropki kwantowej wraz z otoczeniem, w którym znajdują się elektrody mające wpływ na rozkład potencjału w kropce.

Przyjeliśmy kartezjański układ współrzędnych, którego osie zorientowane są w sposób przedstawiony na rysunku 3.1.a. Oś z skierowaliśmy prostopadle do płaszczyzn półprzewodnikowych, jest to tzw. kierunek wzrostu nanostruktury. Oś y jest równoległa do metalowych elektrod T , M , R i P , w jej kierunku skierowane jest przyłożone do układu pole magnetyczne $\vec{B} = (0, B, 0)$.

Początek układu współrzędnych, punkt $(0, 0, 0)$ zaznaczyliśmy na schemacie w miejscu przecięcia się płaszczyzn Ox , Oy i Oz . Płaszczyzna $z = 0$ jest miejscem styku warstw GaAs i AlGaAs, płaszczyzny $x = 0$ i $y = 0$ nie są przypisane do żadnego fizycznego elementu, przyjęliśmy je na skraju pudła obliczeniowego.

W odległości 90 nm powyżej płaszczyzny $z = 0$ znajduje się brzeg warstwy półprzewodnikowej, na który naniesiono metalowe elektrody T , M , R i P . Mają one tak dobrany kształt, aby kropka kwantowa powstawała w obszarze oznaczonym szarym kolorem na rysunku 3.1. Do elektrod podłączone są odpowiednio dobrane ujemne względem potencjału źródła i drenu napięcia. Powstałe pole elektryczne powoduje wypchnięcie gazu elektronowego z obszaru położonego bezpośrednio poniżej elektrod oraz powstanie lokalnego minimum potencjału w obszarze kropki kwantowej. Minimum to powinno być płytkie, gdyż urządzenia konstruowane są z myślą o tym, aby w obszarze pojedynczej kropki kwantowej był zlokalizowany tylko jeden elektron i na takiej sytuacji będziemy się skupiali.

Najprawdopodobniej podstawowe elementy, które będą częściami składowymi bramek kwantowych w komputerze kwantowym, będą miały budowę zbliżoną do opisanego w tym rozdziale urządzenia. Umiejętność teoretycznego opisu własności takich nanourządzeń dałaby fizykom możliwość zaprojektowania urządzeń posiadających zadane parametry. Zatem niezwykle ważne jest opracowanie modelu nanourządzenia pozwalającego wyznaczyć parametry kropki kwantowej oraz funkcje falowe elektronów w niej uwięzionych. W tym celu należy wyliczyć rozkład potencjału elektrostatycznego oraz rozkłady nieskompensowanych ładunków w funkcji zarówno napięć przyłożonych do elektrod, jak i zewnętrznego pola magnetycznego. Model musi uwzględniać parametry materiałowe i fizyczne takie jak: wysokość barier związanych z różnicą składu, kształt elektrod, grubości poszczególnych warstw i temperaturę pracy 300 mK.

Konieczne jest sprawdzenie poprawności modelu przez odtworzenie wyników uzyskanych w eksperymencie opisanym w pracy [47]. W tym celu postaramy się odtworzyć rozkład linii transmisji przedstawiających pary napięć V_M i V_R , dla których autorzy pracy [47] mierzą zmianę ładunku uwięzionego w kropce.

3.1 Potencjał pola elektrostatycznego i jego źródła.

Rozkład potencjału całkowitego pola elektrostatycznego $\varphi_{tot}(\vec{r})$ w nanourządzeniu jest kształtowany przez napięcia przyłożone pomiędzy podłoże i metalowe elektrody znajdujące się na powierzchni struktury oraz przez ładunek znajdujący się wewnątrz heterostruktury. Gęstość tego ładunku $\rho_{tot}(\vec{r})$ opisującą rozkład źródeł potencjału stanowi suma trzech gęstości ładunku mających różną naturę i różny rozkład przestrzenny:

$$\rho_{tot}(\vec{r}) = \rho_{eqd}(\vec{r}) + \rho_d(\vec{r}) + \rho_{el}(\vec{r}). \quad (3.1)$$

Pierwszy składnik sumy $\rho_{eqd}(\vec{r})$ stanowi gęstość ładunku elektronów uwięzionych w kropce kwantowej, jego rozkład uzyskujemy rozwiązując odpowiedni problem kwantowy¹.

Drugi składnik sumy $\rho_d(\vec{r})$ stanowi rozkład ładunku pochodzącego od zjonizowanych donorów w domieszkowanej warstwie nAlGaAs, a trzeci $\rho_{el}(\vec{r})$ stanowi gęstość ładunku elektronów stanowiących dwuwymiarowy gaz elektronowy poniżej warstwy barierowej AlGaAs.

Korzystając z zasady superpozycji można potencjał całkowity $\varphi_{tot}(\vec{r})$ rozdzielić na składniki pochodzące od różnych źródeł i liczyć je osobno. Oddzielnie policzymy potencjał pochodzący od ładunku uwięzionego w kropce kwantowej $\varphi_{eqd}(\vec{r})$.

W ten sposób oddzielimy składową potencjału elektrostatycznego $\varphi_{elst}(\vec{r})$ wchodzącą do wyrażenia na potencjał uwięzienia dla elektronów w kropce kwantowej. Potencjał ten będzie traktowany jako zewnętrzny w kwantowym problemie sztucznego atomu. Potencjał całkowity stanowi sumę obu składników:

$$\varphi_{tot}(\vec{r}) = \varphi_{elst}(\vec{r}) + \varphi_{eqd}(\vec{r}). \quad (3.2)$$

Potencjał $\varphi_{eqd}(\vec{r})$ liczymy korzystając bezpośrednio z prawa Coulomba:

¹problem układu kilku elektronów liczymy metodą mieszania konfiguracji opisaną w Dodatku

$$\varphi_{eqd}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int d^3r' \frac{\rho_e(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (3.3)$$

Potencjał elektrostatyczny pochodzący od pozostałych źródeł ładunku oraz potencjałów przyłożonych do elektrod liczymy z równania Poissona:

$$\nabla^2 \varphi_{elst}(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon\epsilon_0} \quad (3.4)$$

z odpowiednio dobranymi warunkami brzegowymi na powierzchni otaczającej obszar obliczeń. W sposób naturalny znajdziemy warunki brzegowe na potencjał całkowity $\varphi_{tot}(\vec{r})$, a z nich uzyskamy warunki na $\varphi_{elst}(\vec{r})$ poprzez odjęcie:

$$\varphi_{elst}(\vec{r}) = \varphi_{tot}(\vec{r}) - \varphi_{eqd}(\vec{r}). \quad (3.5)$$

Gęstość ładunku $\rho(\vec{r})$ opisującą rozkład źródeł potencjału $\varphi_{elst}(\vec{r})$ stanowi suma dwóch składowych: gęstości ładunku zjonizowanych donorów $\rho_d(\vec{r})$ i gęstości ładunku gazu elektronowego $\rho_{el}(\vec{r})$:

$$\rho(\vec{r}) = \rho_d(\vec{r}) + \rho_{el}(\vec{r}). \quad (3.6)$$

Gęstość ładunku zjonizowanych donorów zależy od rozkładu całkowitego pola elektrostatycznego $\varphi_{tot}(\vec{r})$. Jonizacji ulegają donory położone w miejscach, w których energia potencjalna elektronu liczona względem podłoża jest większa od energii wiązania donora. Ponieważ za potencjał odniesienia przyjmujemy w rachunku potencjał podłoża, warunek na rozkład gęstości zjonizowanych donorów będzie miał postać:

$$\rho_d(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } -|e|\varphi_{tot}(\vec{r}) < E^D \\ |e|n_d(\vec{r}) & \text{gdy } -|e|\varphi_{tot}(\vec{r}) > E^D \end{cases}, \quad (3.7)$$

gdzie n_d stanowi rozkład gęstości wprowadzonych domieszek donorowych, a E^D stanowi energię wiązania donora, która w polu magnetycznym $B = 10$ T leży 10 meV poniżej dna pasma przewodnictwa AlGaAs.

Drugi składnik wyrażenia (3.6) $\rho_{el}(\vec{r})$ stanowi gęstość ładunku elektronów uwięzionych poniżej warstwy barierowej AlGaAs. Jego rozkład stanowi istotny problem rachunkowy.

W sposób dokładny możemy go wyliczyć tylko w obszarze asymptotycznym, to znaczy w dużej odległości od metalowych elektrod. W bezpośrednim sąsiedztwie kropki kwantowej musimy posłużyć się metodą przybliżoną.

3.2 Rozkład potencjału i gęstości ładunku elektronowego w obszarze asymptotycznym.

W obszarze, w którym niejednorodności pola elektrostatycznego wywołane napięciami przyłożonymi do metalowych elektrod mogą być zanedbane, możemy założyć, że pole elektrostatyczne jest równoległe do osi z , co oznacza, że potencjał elektrostatyczny zależy wyłącznie od zmiennej z . W obszarze tym rozkład potencjału pola elektrostatycznego jest wynikiem równowagi pomiędzy zjonizowanymi donorami w warstwie barierowej i uwięzionym poniżej niej gazem elektronowym.

Wybermy oś y układu zgodnie z kierunkiem zewnętrznego pola magnetycznego. Wówczas przy założeniu cechowania Landaua potencjał wektorowy pola elektromagnetycznego ma postać:

$$\vec{A} = (-Bz, 0, 0) \quad (3.8)$$

i prowadzi do hamiltonianu elektronu w polu magnetycznym, w obecności pola elektrostatycznego i skoku dna pasma przewodnictwa wynikającego z różnicy składu warstw półprzewodnika:

$$H(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + i\hbar\omega_c z \frac{\partial}{\partial x} + \frac{m}{2}\omega_c^2 z^2 + U_{band}(z) - |e|\varphi_{elst}(z), \quad (3.9)$$

gdzie:

$$\omega_c = \frac{|e|B}{m}. \quad (3.10)$$

Hamiltonian komutuje z operatorami pędu w kierunku x i y , dlatego funkcji własnej operatora (3.9) oczekujemy w postaci:

$$\psi^{as}(x, y, z) = Ce^{iqx} e^{iky} \phi^{as}(z). \quad (3.11)$$

Po podziałaniu operatorem (3.9) na funkcję (3.11) otrzymujemy równanie, które musi spełniać funkcja $\phi^{as}(z)$. Jest to równanie własne:

$$H_q(z)\phi_{nq}^{as}(z) = \epsilon_{nq}\phi_{nq}^{as}(z) \quad (3.12)$$

operatora $H_q(z)$ postaci:

$$H_q(z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m}{2}\omega_c^2(z - z_q)^2 + U_{band}(z) - |e|\varphi_{elst}(z), \quad (3.13)$$

gdzie: $z_q = \frac{\hbar q}{m\omega_c}$.

Odpowiadające kolejnym stanom wzbudzonym wartości własne ϵ_{nq} oraz funkcje własne $\phi_{nq}^{as}(z)$ operatora $H_q(z)$ nie zależą od wektora falowego k ruchu w kierunku równoległym do pola y , ale zależą od wektora falowego określającego falę płaską w kierunku x . Zależność ta wprowadzana jest poprzez przesunięcie położenia minimum oscylatora z_q . Energię całego układu uzyskujemy dodając do wartości własnych operatora (3.13) energię kinetyczną ruchu w kierunku równoległym do pola:

$$E_{nkq} = \epsilon_{nq} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3.14)$$

Uwięzieniu na skraju bariery ulegają elektrony, których energie są niższe od energii Fermiego, którą przyjęliśmy za energię odniesienia $E^F = 0$, czyli spełniające warunek: $E_{nkq} < 0$.

Po znalezieniu funkcji własnych $\phi_{nq}^{as}(z)$ oraz energii własnych ϵ_{nq} hamiltonianu (3.13), można wyliczyć gęstość ładunku uwięzionego poniżej bariery:

$$\begin{aligned} \rho_{el}^{as}(z) &= \sum_{n,k,q}^{E_{qkn} < 0} -2|e|\psi_{nkq}^{as}(x, y, z)|^2 = \sum_n \frac{-|e|}{2\pi^2} \int_{E_{nkq} < 0} dk dq |\phi_{nq}^{as}(z)|^2 = \\ &= \sum_n \frac{-|e|}{2\pi^2} \int_{\epsilon_{nq} < 0} dq \int_{-k_F}^{k_F} dk |\phi_{nq}^{as}(z)|^2, \end{aligned} \quad (3.15)$$

gdzie $k_F = \sqrt{\frac{-2m\epsilon_{nq}}{\hbar^2}}$.

W wyrażeniu tym możemy wykonać całkowanie po k . Uzyskujemy:

$$\rho_{el}^{as}(z) = \sum_n \frac{-|e|}{\pi^2} \int_{\epsilon_{nq} < 0} dq \sqrt{\frac{-2m\epsilon_{nq}}{\hbar^2}} |\phi_{nq}^{as}(z)|^2. \quad (3.16)$$

Tak wyliczona gęstość ładunku stanowi źródło pola i od niej zależy rozkład potencjału pola elektrostatycznego.

Drugie źródło pola stanowi ładunek zjonizowanych donorów, liczymy go zgodnie z wyrażeniem (3.7), w którym kładziemy $\varphi_{tot}(\vec{r}) = \varphi_{elst}(\vec{r})$, ponieważ w warunkach asymptotycznych możemy zaniedbać potencjał pochodzący od ładunku uwięzionego w kropce kwantowej. Rozkład potencjału pola elektrostatycznego liczymy rozwiązując jednowymiarowe równanie Poissona:

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi_{elst}^{as}(z) = -\frac{\rho_{el}^{as}(z) + \rho_d^{as}(z)}{\epsilon \epsilon_0}. \quad (3.17)$$

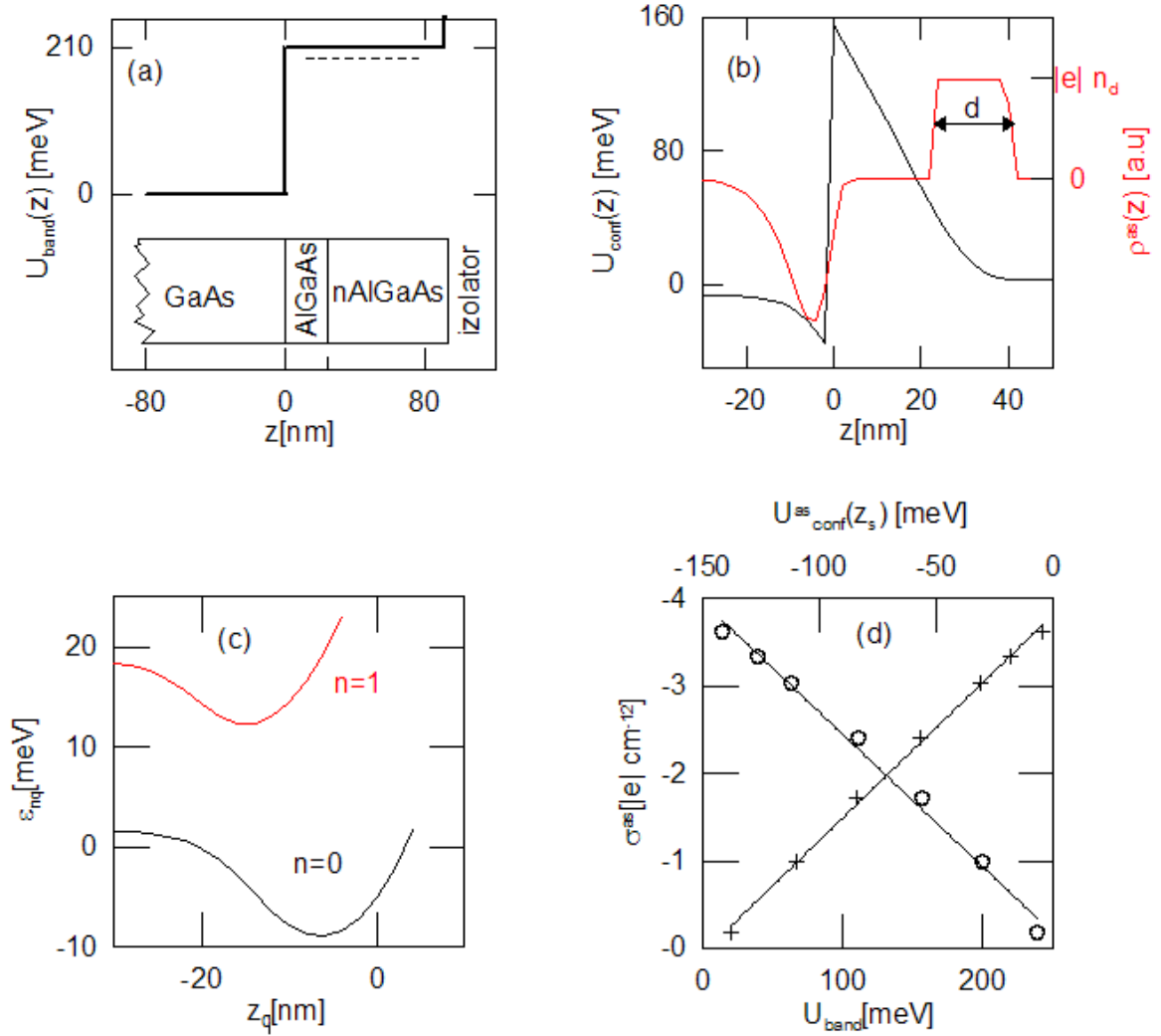
Ponieważ równanie Poissona (3.17) zawiera źródła pola, do wyliczenia których musimy rozwiązać równanie Schrödingera (3.12), a ono z kolei zawiera potencjał elektrostatyczny będący rozwiązaniem równania Poissona, oba równania rozwiązujemy iteracyjnie, aż do uzyskania samouzgodnienia. Równanie (3.12) rozwiązujemy w obszarze poniżej bariery AlGaAs, na odcinku wystarczająco długim, by wyliczona gęstość ładunku elektronów (3.16) zdążyła się wyzerować.

Równanie (3.17) rozwiązujemy w tym samym obszarze, uzupełnionym o odcinek wnikaący w barierę na głębokość większą od spodziewanego zasięgu jonizacji donorów. Samouzgodnienie uzyskujemy, gdy spełnione są jednocześnie dwa warunki. Pierwszy warunek jest spełniony, gdy liczba zjonizowanych donorów jest równa liczbie uwięzionych elektronów, co przejawia się zerowaniem pochodnej potencjału elektrostatycznego po obu stronach przedziału całkowania. Drugi warunek wymaga, by jonizacji uległa taka liczba donorów, aby skok potencjału na podwójnej warstwie dodatnio naładowanych donorów i ujemnie naładowanego gazu elektronowego poniżej bariery wyrównał skok położenia dna pasma przewodnictwa na granicy GaAs i AlGaAs. W rezultacie gęstość powierzchniowa ładunku gazu elektronowego zgromadzonego pod barierą σ_{el}^{as} :

$$\sigma_{el}^{as} = \int \rho_{el}^{as}(z) dz \quad (3.18)$$

zależy od wysokości schodka potencjału (rys. 3.2.b). Ze względu na neutralność ładunkową σ_{el}^{as} jest co do modułu równa powierzchniowej gęstości ładunku zjonizowanych donorów: $\sigma_{el}^{as} = -\sigma_d^{as}$.

Przy założeniu jednorodnego rozkładu donorów w całej objętości warstwy domieszko-
wanej asymptotyczny zasięg jonizacji d jest stały $\sigma_d^{as} = n_d d$. Dla odpowiednio do-
branego d spełniony jest drugi warunek samouzgodnienia.



Rys. 3.2: (a) energia elektronu w heterostrukturze $U_{band}(z)$ wynikająca z przesunięcia dna pasma przewodnictwa, linią przerywaną zaznaczono położenie poziomu donorowego w nAlGaAs, u dołu rysunku zamieściliśmy schemat ułożenia warstw płanarnych. (b) całkowita energia potencjalna elektronu $U_{conf}(z)$ (linia czarna) i gęstość ładunku $\rho^{as} = \rho_d^{as} + \rho_{el}^{as}$ (linia czerwona) dla warunku asymptotycznego. (c) wartość energii ϵ_{nq} dla $n = 0$ i $n = 1$ w funkcji z_q . (d) ładunek powierzchniowy gazu elektronowego σ_{el}^{as} w funkcji wysokości bariery U_{band} (krzyże). Zamieszczono również zależność σ_{el}^{as} od głębokości studni $U_{conf}^{as}(z_s)$ (okręgi).

Założenie nominalnego składu $Al_xGa_{1-x}As$, który wynosił $x = 0.27$ daje wysokość bariery $U = 229\text{meV}$. Wyliczona asymptotyczna gęstość powierzchniowa ładunku wyniosła $-3.5 \cdot 10^{11} |e|\text{cm}^{-2}$. Liczba ta jest bliska wartości eksperymentalnej, która wynosi $-3 \cdot 10^{11} |e|\text{cm}^{-2}$ [47]. Odstępstwo wyniku obliczeń od wartości eksperymentalnej może wynikać z zaniedbania oddziaływania pomiędzy elektronami gromadzącymi się poniżej bariery potencjału. W celu skompensowania tego efektu w dalszym ciągu pracy założona została nieco niższa wysokość bariery $U_{band} = 200\text{meV}$, by obliczona gęstość gazu elektronowego pokryła się z eksperymentalną.

Autorzy pracy [47] podają, że w dwuwymiarowym gazie elektronowym zalegającym w studni kwantowej obsadzony jest tylko stan podstawowy ruchu elektronu w kierunku z . Nasze obliczenia odtwarzają ten fakt, zamieszczona na rys. 3.2.c energia ϵ_{nq} jest ujemna tylko dla $n = 0$. Oznacza to, że w (3.16) możemy opuścić sumę, a wkład do gęstości ρ_{el}^{as} będzie pochodził jedynie od stanu $n = 0$.

3.3 Rozkład potencjału i gęstości ładunku elektronowego w pobliżu elektrod.

W obszarze położonym bezpośrednio pod elektrodami energia potencjalna elektronów jest dodatnia również poniżej warstwy barierowej AlGaAs i dwuwymiarowy gaz elektronowy jest z niego usuwany. W miarę oddalania się od elektrod energia potencjalna elektronu maleje, gdy staje się ujemna gaz elektronowy nie jest całkowicie usuwany. Poprawne uwzględnienie tego procesu jest niezwykle istotne, ponieważ decyduje o kształcie i rozmiarach barier potencjału, które oddzielają wewnątrz kropki kwantowej od bocznych rezerwuarów ładunku.

Gęstość elektronowa $\rho_{el}(x, y, z)$ zależy od rozkładu potencjału $\varphi_{tot}(x, y, z)$. Zależności tej niestety nie da się wyznaczyć w sposób dokładny. Musimy uwzględnić ją w sposób przybliżony. Zakładamy, że w obszarze, w którym energia potencjalna elektronu jest większa od energii Fermiego ($E_F = 0$), gęstość ładunku elektronowego jest równa 0. W obszarze, gdzie energia potencjalna elektronu jest mniejsza od energii Fermiego przyjmujemy proporcjonalny do energii potencjalnej elektronu udział gęstości uzyskany dla rozwiązania asymptotycznego:

$$\rho_{el}(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } \tau \leq 0 \\ \tau \rho_{el}^{as}(z) & \text{gdy } \tau > 0 \end{cases}, \quad (3.19)$$

gdzie:

$$\tau = \frac{U_{conf}(x, y, z_s)}{U_{conf}^{as}(z_s)} = \frac{-|e|\varphi_{tot}(x, y, z_s) + U_{band}(z_s)}{|e|\varphi_{elst}^{as}(z_s) + U_{band}(z_s)}. \quad (3.20)$$

Występujące w powyższym warunku z_s , odpowiada położeniu środka ciężkości ładunku elektronów w obszarze asymptotycznym:

$$z_s = \frac{1}{\sigma_{el}^{as}} \int z \rho_{el}^{as}(z) dz. \quad (3.21)$$

Przyjęty rozkład gęstości $\rho_{el}(x, y, z)$ (3.19) zapewnia prawidłowe odtworzenie rozkładu gazu elektronowego w obszarze asymptotycznym (w tej granicy $\tau = 1$) i symuluje wypychanie gazu elektronowego z obszarów, w których energia potencjalna elektronu jest dodatnia. Przyjęcie warunku (3.20) w punkcie z_s usuwa ładunek z obszaru, w którym obszar ujemnej energii potencjalnej tworzy jamę zbyt małą do uwięzienia elektronów.

3.4 Warunek brzegowy dla rozwiązania równania Poissona.

Równanie Poissona rozwiązujemy w trójwymiarowym obszarze przestrzeni obejmującym kropkę kwantową, odpowiednio duże fragmenty elektrod, do których podłączone są napięcia sterujące oraz otoczenie, które może wpłynąć na wynik obliczeń rozkładu potencjału w kropce kwantowej. Jako obszar całkowania wybieramy prostopadłościenne pudło obliczeniowe o długościach krawędzi L_x , L_y , L_z . Musi ono być na tyle rozległe, by jego zwiększanie nie zmieniało wyników obliczeń potencjału w kropce kwantowej. Standardowym testem jest wykonanie obliczeń dla rosnących rozmiarów pudła i wybranie ostatecznych rozmiarów, dla których nasycą się krzywa zależności potencjału w środku kropki kwantowej w funkcji rozmiarów pudła obliczeniowego. Ostatecznie przyjęte w rachunkach pudło obliczeniowe miało następujące rozmiary:

$L_x = L_y = 600$ nm, $L_z = 490$ nm. Usytuowanie pudła obliczeniowego względem elektrod nanourządzenia w kierunkach xy widać na rysunku 3.1.b. W kierunku osi z obszar pudła przyjęto 200 nm poniżej i 290 nm powyżej płaszczyzny skoku potencjału na złączu AlGaAs/GaAs, czyli miejsca, w którym powstaje kropka kwantowa.

Dla uzyskania jednoznacznego rozwiązania równania Poissona wymagane jest określenie warunków brzegowych na powierzchni zamkniętej otaczającej obszar całkowania oraz na powierzchniach przewodników znajdujących się wewnątrz obszaru obliczeniowego [86]. Narzucamy je na sześciu ściankach pudła obliczeniowego oraz wewnątrz objętych pudłem obliczeniowym metalowych elektrod. Warunki brzegowe narzucamy na całkowity potencjał $\varphi_{tot}(\vec{r})$, następnie zgodnie z wyrażeniem (3.5) przeliczamy na $\varphi_{elst}(\vec{r})$.

Na elektrodach całkowity potencjał elektrostatyczny jest stały i określony przez przyłożone do nich napięcia. Na ich powierzchni narzucamy więc warunki Dirichleta, zadając wartości potencjału, analogicznie jak to zrobiliśmy w rozdziale 2:

$$\varphi_{tot} = V_X + U_{Sch} , \quad (3.22)$$

gdzie X numeruje elektrody P , T , M i R , V_X stanowi napięcie przyłożone do elektrody X , a U_{Sch} stanowi napięcie Schottky'ego pojawiające się na styku metal półprzewodnik i wynoszące dla GaAs -0.65 V.

Na ściankach pudła obliczeniowego określamy warunki von Neumanna, żądając zerowania się pochodnej normalnej potencjału do powierzchni danej ścianki:

$$\vec{n} \cdot \nabla \varphi_{tot} = 0 , \quad (3.23)$$

gdzie \vec{n} jest wektorem normalnym do odpowiedniej ścianki. Warunki von Neumanna narzucone na całą powierzchnię pudła obliczeniowego są zgodnie z prawem Gaussa równoznaczne z żądaniem neutralności ładunkowej zawartego w nim układu.

Na ściankach pionowych (prostopadłych do planarnej struktury) warunek von Neumanna sprowadza się do żądania równoległości pola elektrycznego do osi z .

Jest on równoznaczny z warunkiem wykorzystanym w rachunku asymptotycznym.

3.5 Procedura numeryczna, samouzgodnienie pole-ładunek.

Równanie Poissona rozwiązywane jest na trójwymiarowej siatce przestrzennej metodą różnic skończonych. Krok siatki został dobrany metodą prób w ten sposób, aby mogły być poprawnie uwzględnione kształty elektrod i rozkłady ładunków. W kierunkach x, y wystarczający okazał się krok siatki $\Delta_x = \Delta_y = 12.5$ nm. W kierunku z krok siatki musiał być znacznie mniejszy ze względu na stosunkowo silną lokalizację w tym kierunku gazu elektronowego poniżej bariery potencjału. Wystarczający okazał się dopiero krok siatki $\Delta_z = 2$ nm.

W kolejnych iteracjach modyfikowane są zależne od siebie rozkłady potencjału $\varphi_{elst}(x, y, z)$ i ładunku $\rho_{tot}(x, y, z)$, podobnie jak to zostało przedstawione w rozdziale 2.5. Sam algorytm zmodyfikowaliśmy tak, żeby uwzględnić w rachunku gaz elektronowy, oraz brak symetrii cylindrycznej. Przepiszmy równanie Poissona (3.4) we współrzędnych kartezjańskich:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi_{elst}(x, y, z) + \frac{\rho(x, y, z)}{\varepsilon \varepsilon_0} = 0 \quad . \quad (3.24)$$

Po zastąpieniu w nim pochodnych ilorazami różnicowymi oraz odpowiednim przegrupowaniu wyrazów uzyskujemy wyrażenie do wykorzystania w iteracyjnej procedurze wyliczenia potencjału:

$$\begin{aligned} \varphi_{elst}^{n+1}(x_i, y_i, z_i) = & (1 - w) \varphi_{elst}^n(x_i, y_i, z_i) + w \left[\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{1}{\Delta_y^2} + \frac{1}{\Delta_z^2} \right]^{-1} \cdot \\ & \left[\frac{\varphi_{elst}^n(x_i + \Delta_x, y_i, z_i) + \varphi_{elst}^n(x_i - \Delta_x, y_i, z_i)}{\Delta_x^2} + \frac{\varphi_{elst}^n(x_i, y_i + \Delta_y, z_i) + \varphi_{elst}^n(x_i, y_i - \Delta_y, z_i)}{\Delta_y^2} \right. \\ & \left. + \frac{\varphi_{elst}^n(x_i, y_i, z_i + \Delta_z) + \varphi_{elst}^n(x_i, y_i, z_i - \Delta_z)}{\Delta_z^2} + \frac{\rho^n(x_i, y_i, z_i)}{\varepsilon \varepsilon_0} \right] \quad . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Zgodnie z wyrażeniem (3.6) gęstość ładunku wchodząca do równania Poissona (3.4) jest sumą dwóch składników: gęstości ładunku zjonizowanych donorów, której zależność od rozkładu potencjału dana jest wyrażeniem (3.7) oraz gęstości zgromadzonego poniżej bariery gazu elektronowego z zależnością od potencjału daną wyrażeniem (3.19). Obie gęstości liczymy w każdej iteracji.

Trzeci rodzaj ładunku występujący w nanourządzeniu - ładunek elektronów uwięzionych w kropce kwantowej wchodzi do równania Poissona poprzez warunek brzegowy (3.5). Rozkład tego ładunku znajdujemy rozwiązując kwantowy problem układu kilku cząstek w potencjale zewnętrznym. Rachunki te nawet w przypadku obecności tylko jednego elektronu w kropce kwantowej są czasochłonne i nie mogą być wykonywane w każdej iteracji. Wprowadzamy dla nich dodatkową pętlę iteracyjną.

Rachunki iteracyjne prowadzimy do uzyskania samouzgodnienia rozkładu ładunku pochodzącego od wszystkich trzech źródeł i rozkładu potencjału elektrostatycznego.

Postępujemy według następującego schematu:

1. Ustalamy napięcia przyłożone do elektrod i liczbę elektronów uwięzionych w kropce kwantowej. Narzucamy warunki brzegowe na potencjał całkowity φ_{tot} na elektrodach i powierzchniach bocznych pudła obliczeniowego.
2. Wprowadzamy warunki początkowe. We wszystkich punktach leżących poniżej elektrod przyjmujemy, że wszystkie donory zostają zjonizowane, a gaz elektronowy jest całkowicie usunięty. W punktach nie leżących poniżej elektrod przyjmujemy gęstość ładunku zjonizowanych donorów i gęstość ładunku gazu elektronowego zgodnie z wcześniej wykonanymi rachunkami asymptotycznymi. Rozkład gęstości ładunku uwięzionego w kropce kwantowej przyjmujemy w postaci gaussianu:

$$\rho_{eqd}(x, y, z) = \frac{-N|e|}{\pi^{3/2}a_x a_y a_z} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{a_x^2} - \frac{(y-y_0)^2}{a_y^2} - \frac{(z-z_0)^2}{a_z^2}\right), \quad (3.26)$$

gdzie N oznacza liczbę elektronów uwięzionych w kropce, a rozmiary gaussianu przyjmujemy następujące: $a_x = 10$ nm, $a_y = 10$ nm, $a_z = 3$ nm. Gaussian centrujemy w oczekiwanym minimum energii potencjalnej, $x_0 = 250$ nm, $y_0 = 200$ nm, $z_0 = -9$ nm.

3. Według wzoru (3.3) liczymy potencjał $\varphi_{eqd}(\vec{r})$ pochodzący od ładunku uwięzionego w kropce. Z warunków brzegowych (3.22-3.23) na $\varphi_{tot}(\vec{r})$ znajdujemy, korzystając z (3.5) warunki brzegowe na $\varphi_{elst}(\vec{r})$.
4. Wykonujemy procedurę iteracyjną w wersji trójwymiarowej opisaną wzorem (3.25), aż do uzyskania samouzgodnienia rozkładu potencjału elektrostatycznego z gęstością ładunku zjonizowanych donorów i gęstością gazu elektronowego uwięzionego poniżej bariery AlGaAs.

5. Rozwiązujemy problem własny układu N elektronów uwięzionych w kropce kwantowej utworzonej przez potencjał wyliczony w punkcie 4. Znajdujemy nowy rozkład gęstości elektronów w kropce i wracamy do punktu 3. Samouzgodnienie gęstości ładunku uwięzionych w kropce elektronów uzyskujemy bardzo szybko, zazwyczaj w kilku krokach iteracyjnych (3-5).

Procedura iteracyjna wykonywana w punkcie 4 przedstawionego schematu, podobnie jak w przypadku symetrii cylindrycznej jest bardzo wolno zbieżna. Zastosowaliśmy więc symulowane „schładzanie” układu przedstawione w poprzednim rozdziale (poddz. 2.3), z dodaniem zależności rozkładu ładunku gazu elektronowego uwięzionego poniżej bariery AlGaAs od temperatury:

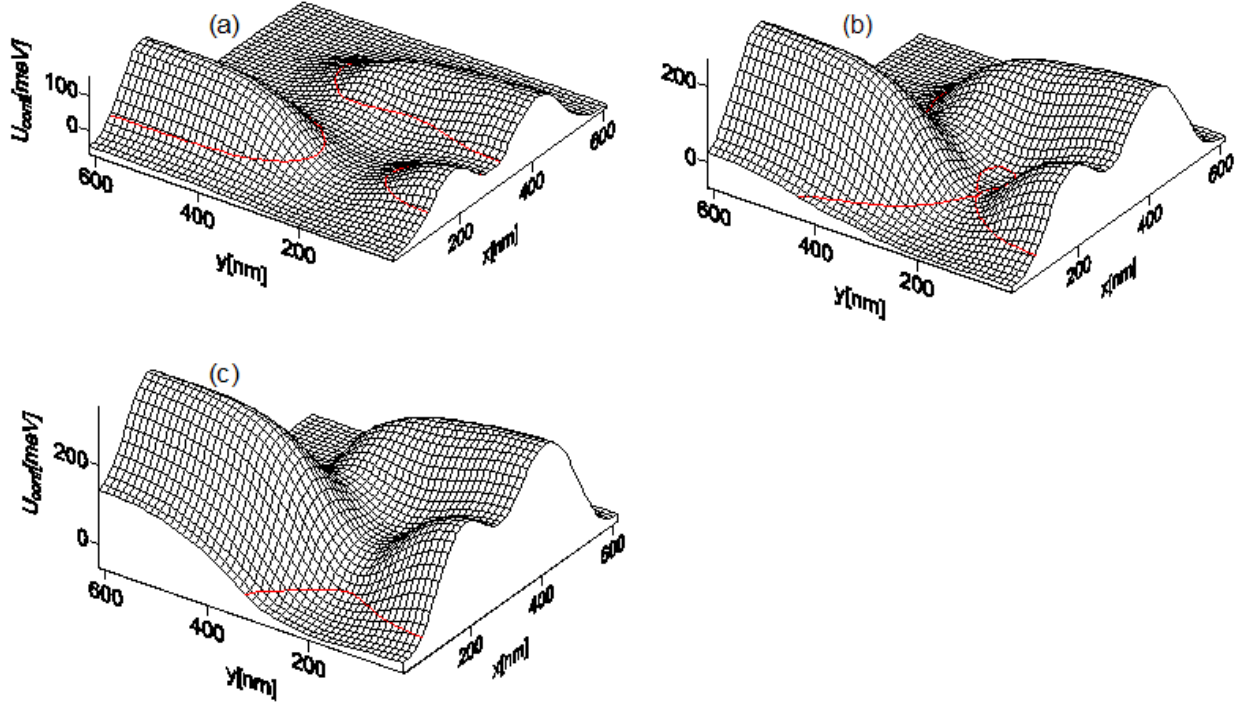
$$\rho_{el}(\vec{r}) = \frac{\tau \rho_{el}^{as}(z)}{1 + \exp\left(\frac{-|e|\varphi_{tot}(x, y, z_s) + U_{band}(z_s)}{k_B T}\right)}, \quad (3.27)$$

gdzie τ jest dane wyrażeniem (3.20). Wyrażenie to w granicy $T \rightarrow 0$ przechodzi w wyrażenie (3.19).

3.6 Parametr dopasowania.

Parametry geometryczne i materiałowe całego nanourządzenia oraz napięcia przykładowe do elektrod P , M i R przyjęliśmy zgodnie z danymi przedstawionymi w pracy [47]. Jedynym parametrem, który nie jest dobrze określony była gęstość domieszek donorowych n_d . Została ona przez nas potraktowana jako parametr dopasowania.

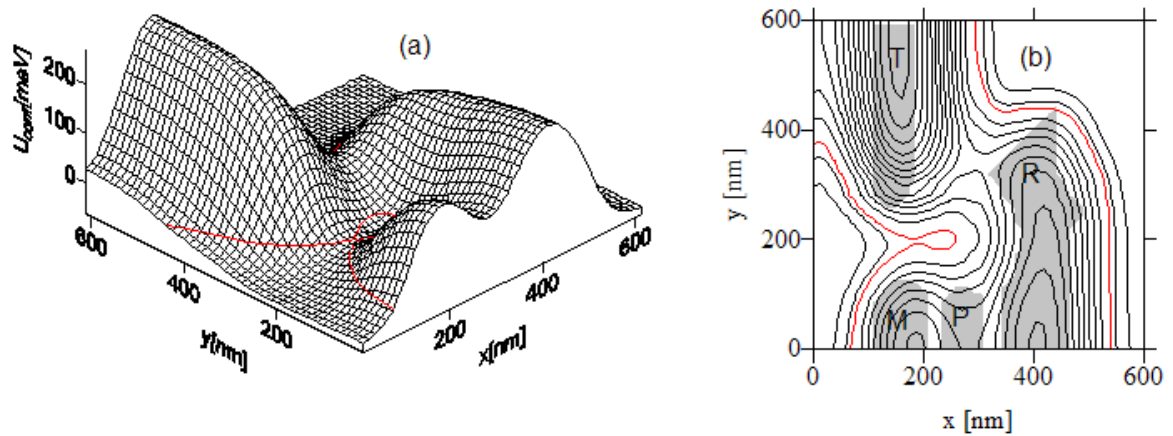
Dobraliśmy ją tak, żeby dla napięć $V_M = -1.07$ V, $V_R = -0.96$ V, $V_P = 0$ V otrzymać przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z)$, dla którego energia pojedynczego elektronu uwięzionego w kropce wyniosła zero. Są to napięcia, dla których obserwuje się w eksperymencie przejście pierwszego elektronu do kropki. Dla przyjętej zbyt dużej gęstości n_d energia potencjalna w kropce jest zbyt niska, co widać na rys. 3.3a. Wtedy dla napięć $V_M = -1.07$ V, $V_R = -0.96$ V w kropce może zlokalizować się nie jeden, a kilka elektronów, lub obszar kropki może zostać zalany przez gaz elektronowy. Z kolei dla zbyt małego n_d energia potencjalna elektronu w kropce jest zbyt duża i kropka będzie pusta (rys. 3.3.c). Właściwą energię potencjalną przedstawioną na rys. 3.3.b. uzyskuje się dla gęstości donorów $n_d = 2.053 \cdot 10^{17}$ cm⁻³.



Rys. 3.3: Przebieg energii potencjalnej elektronu dla domieszkowania: (a) $2.500 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (b) $2.053 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, (c) $1.800 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Czerwoną linią oznaczono poziom Fermiego. Skala na rysunkach jest ta sama. Napięcia na elektrodach wynosiły: $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.96 \text{ V}$, $V_P = 0 \text{ V}$ i $V_T = -1.3 \text{ V}$.

3.7 Rozkład potencjału w nanourządzeniu.

Przeprowadźmy dyskusję rozkładu potencjału przy napięciach przyłożonych do elektrod takich, jakie były zadane w eksperymencie [47]: $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.96 \text{ V}$, $V_P = 0 \text{ V}$ oraz dla napięcia $V_T = -1.3 \text{ V}$. Po przyłożeniu napięć do elektrod w nanourządzeniu wygeneruje się niejednorodne pole elektryczne. Potencjał uwięzienia bocznego (w kierunkach $x - y$), możemy wydobyć używając przekroju płaszczyzną prostopadłą do osi z , która będzie przecinała obszar kropki kwantowej. Kropka zlokalizowana jest w warstwie GaAs, która w naszym układzie współrzędnych opisana jest ujemnymi wartościami z .



Rys. 3.4: Energia elektronu w nanostrukturze $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$. (a) wykres quasi-trójwymiarowy, (b) poziomicę. Na rysunkach zaznaczono linią czerwoną położenie energii Fermiego. Na rysunku (b) kolorem szarym oznaczone jest położenie elektrod. Napięcia na elektrodach wynosiły: $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.96 \text{ V}$, $V_P = 0 \text{ V}$ i $V_T = -1.3 \text{ V}$.

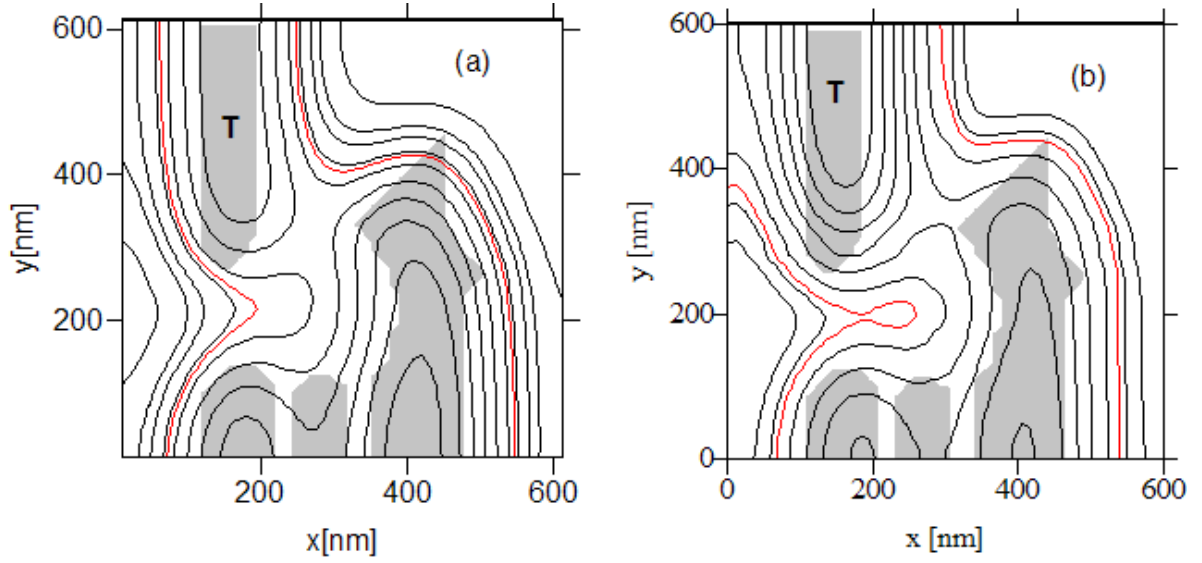
Na rys. 3.4.a i 3.4.b przedstawiliśmy przebieg potencjału uwięzienia w przekroju płaszczyzną $z = -6 \text{ nm}$ na dwa sposoby. Rysunek 3.4.a zawiera bardziej intuicyjny, quasi-trójwymiarowy przebieg energii potencjalnej. Na rys. 3.4.b zamieściliśmy dostarczające więcej informacji poziomicę. Czerwoną poziomicą zaznaczono wartość energii potencjalnej elektronu $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm}) = E_F$. Lokalne minimum potencjału znajduje się w punkcie o współrzędnych $(x = 220 \text{ nm}, y = 200 \text{ nm})$.

W pobliżu minimum tworzy się kropka kwantowa, a otaczające ten obszar bariery potencjału stanowią potencjał uwięzienia bocznego.

3.8 Kanały transmisji.

Jak widzimy na rys. 3.4.a i 3.4.b potencjał uwięzienia bocznego posiada w dwóch miejscach punkty siodłowe, w których bariery potencjału są obniżone. Są to kanały transmisji, przez które elektrony mogą tunelować pomiędzy rezerwuarem gazu elektronowego a kropką kwantową. Kanał znajdujący się pomiędzy elektrodą T i M nazwiemy lewym kanałem transmisji, a znajdujący się pomiędzy elektrodami R i T prawym kanałem transmisji.

Na wysokość barier tunelowych w obydwu kanałach transmisji największy wpływ ma wartość napięcia V_T . Im wyższe napięcie V_T tym bariera będzie niższa.

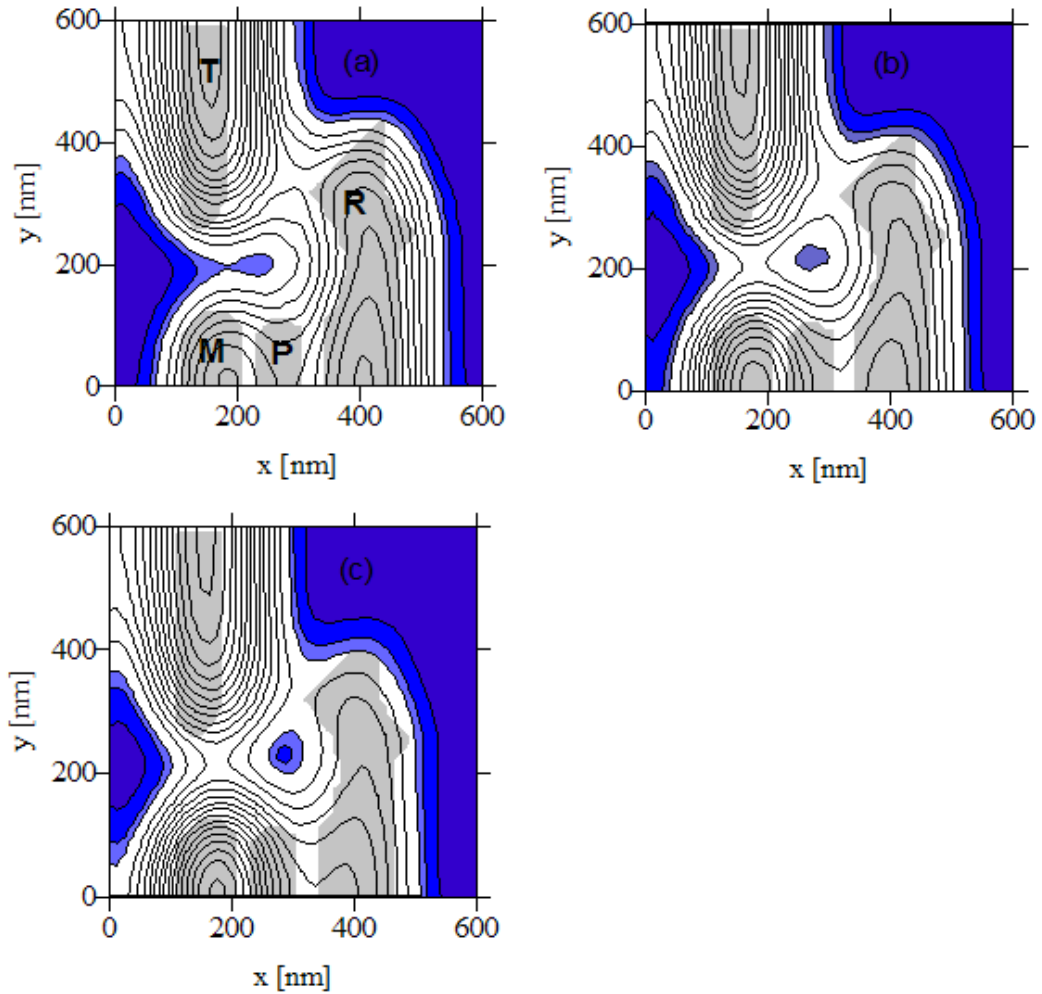


Rys. 3.5: Przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ dla napięcia (a) $V_T = -1.1 \text{ V}$ (b) $V_T = -1.3 \text{ V}$. Pozostałe napięcia wynoszą: $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.96 \text{ V}$, $V_P = 0 \text{ V}$. Linia czerwoną zaznaczono poziom Fermiego.

Jeśli napięcie będzie zbyt wysokie, to nie wytworzy się bariera oddzielająca obszar zalegania gazu elektronowego od obszaru kropki kwantowej (rys. 3.5.a), przez co nie otrzyma się kropki kwantowej. Przy $V_T \approx -1.3 \text{ V}$ wysokość barier pozwala uzyskać zgodną z eksperymentem wysokość obu kanałów transmisji. Przy rozkładzie potencjału przedstawionym na rysunku 3.5.b widać, że elektrony mogą przechodzić tylko przez kanał lewy, gdzie wartość energii potencjalnej jest niska.

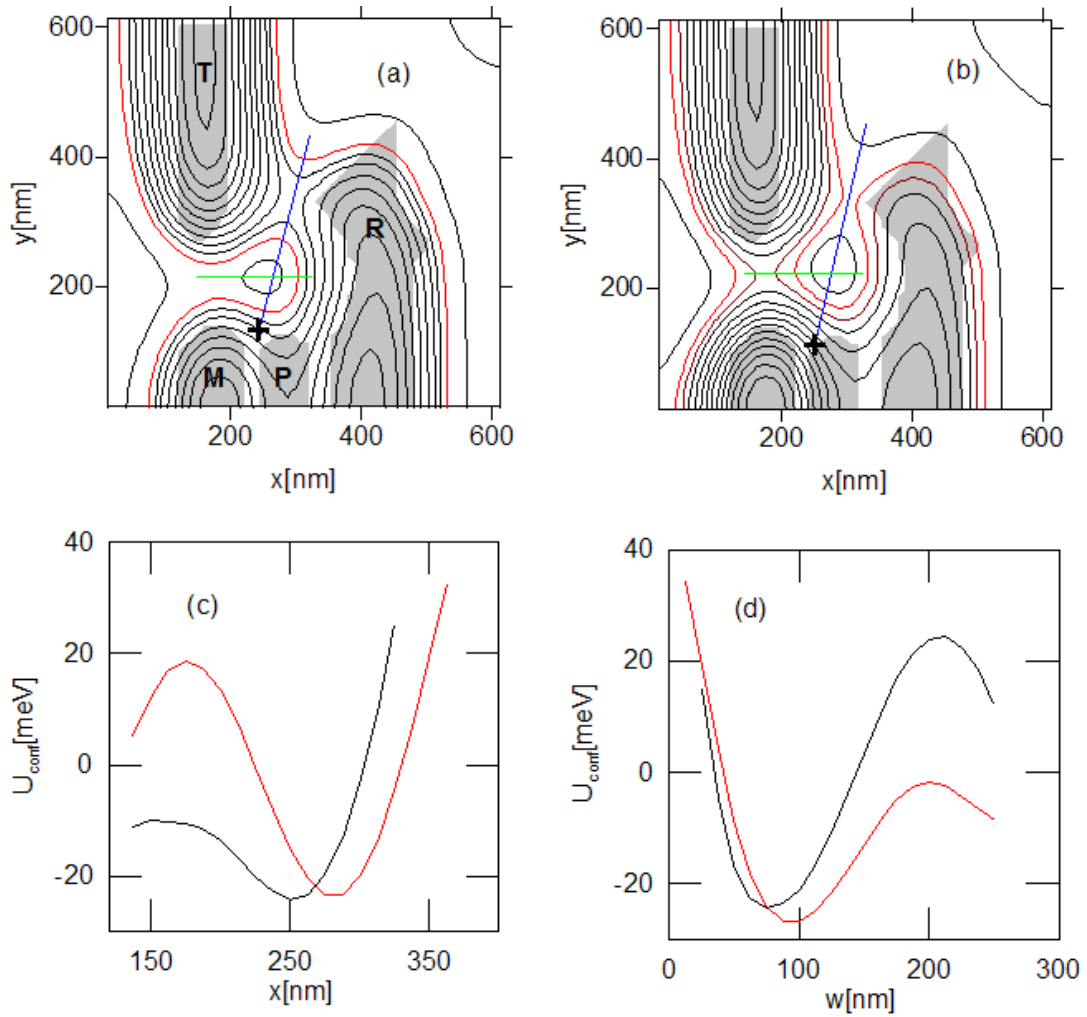
Zmieniając układ napięć można regulować wysokość barier i otwierać lub zamykać kanały. Przebieg barier zależy od wszystkich czterech napięć na czterech elektrodach. Manipulowanie aż czterema parametrami – napięciami jest kłopotliwe, dlatego w eksperymencie [47] zmieniano napięcia tylko na dwóch elektrodach M i R . My chcemy odtworzyć wyniki eksperymentalne, dlatego postąpimy podobnie i napięcia V_T i V_P ustalimy, a zmieniać będziemy V_M i V_R .

Na rys. 3.6 przedstawione są trzy przebiegi energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ dla trzech par napięć V_M i V_R . Pary te są tak dobrane, by energia pojedynczego elektronu uwięzionego w kropce kwantowej E_1 była równa E_F . Rys. 3.6.a jest identyczny z 3.4b, na rys. 3.6.b przedstawiony jest rozkład potencjału po przyłożeniu mniejszego o 140 mV napięcia na elektrodę M . Przyłożenie niższego napięcia V_M powoduje podwyższenie energii potencjalnej w lewym kanale transmisji i jego zablokowanie.



Rys. 3.6: Przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ dla napięcia na elektrodach: (a) $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.96 \text{ V}$, (b) $V_M = -1.21 \text{ V}$, $V_R = -0.9 \text{ V}$, (c) $V_M = -1.35 \text{ V}$, $V_R = -0.82 \text{ V}$. Przyjęto napięcia $V_P = 0 \text{ V}$ i $V_T = -1.3 \text{ V}$.

Wysoka wartość energii potencjalnej w lewym kanale uniemożliwia przechodzenie elektronu pomiędzy kropką a gazem elektronowym. Zauważmy, że wraz z obniżeniem napięcia V_M musieliśmy podwyższyć napięcie V_R o 55 mV, aby energia elektronu lokalizowanego w kropce pozostawała na poziomie Fermiego $E_1 = E_F$. Pomimo znacznego zwiększenia napięcia przyłożonego na elektrodę R prawy kanał pozostaje nadal zamknięty. Dalsze zwiększanie napięcia na elektrodzie R (do $V_R = -0.82 \text{ V}$) i zmniejszanie napięcia na elektrodzie M nie spowoduje wystarczającego pogłębienia prawego kanału transmisji (Rys. 3.6.c). Powodem tego jest umiejscowienie pomiędzy obszarem kropki i gazem elektronowym „dzióbka” na elektrodzie R .



Rys. 3.7: (a-b) przebiegi energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ dla konfiguracji napięć: (a) $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.92 \text{ V}$, (b) $V_M = -1.35 \text{ V}$, $V_R = -0.75 \text{ V}$. Zaznaczono położenia kanałów transmisji: lewego (odcinek zielony) i prawego (odcinek niebieski). (c-d) Przebieg energii potencjalnej wzdłuż kanału (c) lewego $U_{conf}(x, y = 212.5 \text{ nm}, z = -6 \text{ nm})$ i (d) prawego $U_{conf}(x(w), y(w), z = -6 \text{ nm})$. Parametr w oznacza mierzoną wzdłuż kanału prawego odległość od punktu „+”. Linia czarną oznaczyliśmy przebiegi dla konfiguracji napięć z rys. (a), a czerwoną z rys. (b).

Kanał prawy można otworzyć przez obniżenie napięcia na elektrodzie R , przy zachowaniu stałego napięcia na elektrodzie M , na przykład dla konfiguracji napięć $V_M = -1.35 \text{ V}$ i $V_R = -0.75 \text{ V}$, dla których przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ przedstawiliśmy na rys. 3.7.b. Prawy kanał transmisji jest otwarty i elektrony mogą przez niego przechodzić. Kanał lewy jest zamknięty. Dla tej konfiguracji napięć minimum w kropce będzie głębsze i rozleglejsze, zdolne uwięzić większą ilość elektronów.

W tym wypadku uwięzieniu ulegną trzy elektrony. Na rys. 3.7.a zamieściliśmy przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$ dla napięć $V_M = -1.07 \text{ V}$, $V_R = -0.92 \text{ V}$, dla których pojemność kropki również wynosi $N = 3$, ale otwarty jest lewy kanał transmisji. Przebieg energii potencjalnej wzdłuż kanałów lewego (odcinek zaznaczony kolorem zielonym) i prawego (odcinek zaznaczony kolorem niebieskim) przedstawiliśmy na rys. 3.7.c-d. Dla wysokich napięć V_M elektron będzie mógł przechodzić kanałem lewym, a dla niskich kanałem prawym.

Dla napięć pośrednich obydwie bariery będą posiadać zbliżoną wysokość. Jeśli ta wysokość będzie duża, tunelowanie nie będzie miało miejsca. Efekt ten jest wyraźnie widoczny w eksperymencie.

3.9 Linie transmisji.

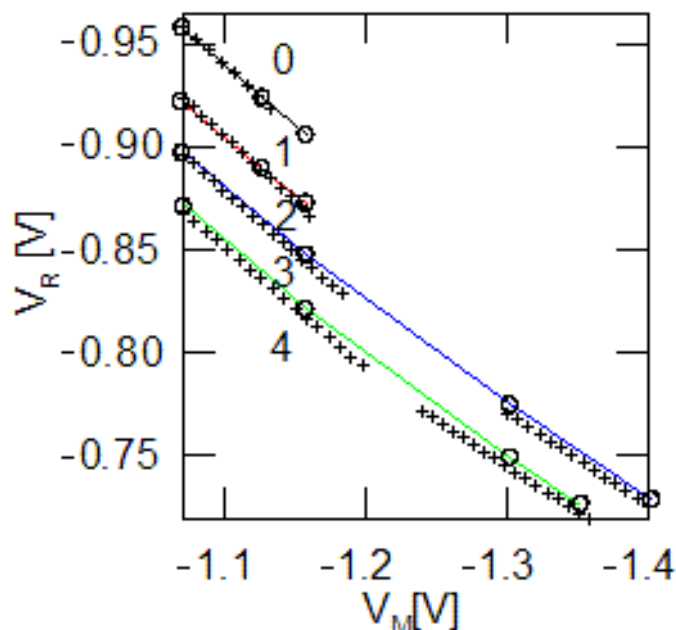
Warunkiem koniecznym tunelowania elektronu z rezerwuaru do kropki zawierającej $N - 1$ elektronów jest ujemna wartość potencjału elektrochemicznego μ_N układu N elektronów uwięzionych w kropce. Przypomnijmy, potencjał elektrochemiczny μ_N jest to różnica pomiędzy energią stanu podstawowego układu N elektronowego i $N - 1$ elektronowego: $\mu_N = E_N - E_{N-1}$. Tunelowanie elektronu z powrotem do rezerwuaru elektronów następuje, gdy potencjał elektrochemiczny μ_N jest dodatni.

Przy odpowiednio dobranych napięciach na elektrodach M i R , dla których potencjał elektrochemiczny zeruje się, niewielka składowa zmienna napięcia przyłożonego do znajdującej się pomiędzy elektrodami R i M elektrody P powoduje transmisję elektronów z rezerwuaru elektronowego do kropki i z powrotem.

Spełniające ten warunek pary napięć V_R i V_M układają się na wykresie w linie nazywane liniami transmisji.

Autorzy pracy [47] wyznaczyli eksperymentalnie linie transmisji dla kropek kwantowych zawierających $N = 0, 1, 2, 3$ i 4 elektrony. Wykorzystując teorię przedstawioną w podrozdziałach (3.1-3.6) wyznaczyliśmy teoretyczne przebiegi tych linii i na rys. 3.8 zestawiliśmy je z danymi eksperymentalnymi. Wyniki naszych obliczeń bardzo dobrze odtwarzają eksperymentalne położenia linii transmisji. Otrzymaliśmy poprawne zarówno odległości pomiędzy liniami jak i nachylenia poszczególnych linii.

Uzyskaliśmy eksperymentalnie obserwowaną zmianę nachylenia linii $N = 3$ i $N = 4$, przy przejściu z V_M niskich do V_M wysokich. Ten efekt jest spowodowany przesuwaniem się minimum potencjału. Wraz z rosnącym napięciem V_R minimum potencjału i kropka kwantowa przesuwa się w stronę elektrody R .



Rys. 3.8: Przebieg linii transmisji w funkcji napięć V_M i V_R . Linie wyznaczone teoretycznie zaznaczono kolorowymi odcinkami, które poprowadziliśmy pomiędzy parami napięć V_M i V_R (na schemacie - okręgi). Dla tych par napięć wyliczony potencjał elektrochemiczny μ_N wynosi 0. Dane eksperymentalne [47] zaznaczyliśmy krzyżykami, których wielkość odzwierciedla rozrzut punktów pochodzących z pomiaru. Cyframi oznaczono liczbę elektronów lokalizujących się w kropce dla danych napięć.

Mniejsza odległość do tej elektrody powoduje, że potencjał uwięzienia będzie zależał silniej od napięcia V_R .

Jak widzimy na rys. 3.8, pierwsza i druga linia transmisji urywa się całkowicie, a linia trzecia po urwaniu dla napięcia $V_M = -1.2$ V znowu jest obserwowana dla $V_M = -1.3$ V. Urywanie się linii następuje gdy bariery oddzielające kropkę od gazu są wysokie.

Efekt zaniku linii udało nam się odtworzyć w sposób jakościowy, przez wyznaczenie wysokości barier tunelowych od napięć (rozdział 3.8).

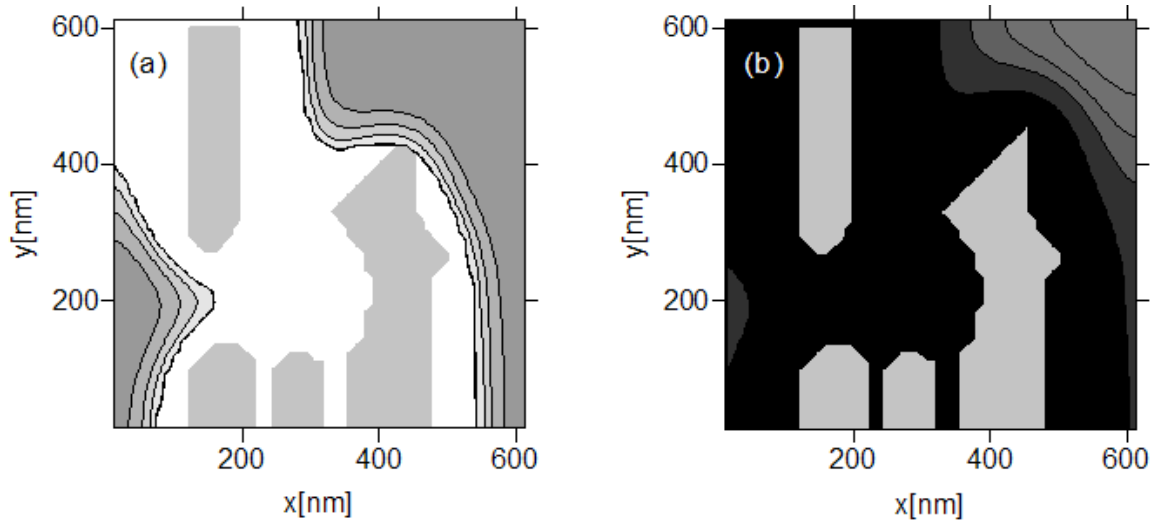
3.10 Rozkład ładunków w nanourządzeniu.

Rozwiązując problem Poissona-Schrödingera wyznaczyliśmy rozkład ładunku zjonizowanych donorów, dwuwymiarowego gazu elektronowego oraz uwięzionych elektronów. Donory ulegają jonizacji, gdy energia potencjalna elektronu zlokalizowanego na centrum donorowym jest większa od energii Fermiego (3.7). Rozkład zjonizowanych donorów scałkujemy w kierunku z , aby uzyskać gęstość powierzchniową ładunku:

$$\sigma_d(x, y) = \int \rho_d(x, y, z) dz . \quad (3.28)$$

Rozkład $\sigma_d(x, y)$ przedstawiliśmy na rys. 3.9.b. Poniżej elektrod oraz w pobliżu kropki wszystkie donory są zjonizowane. Dopiero w dużej odległości od elektrod w kierunkach $x - y$ ilość zjonizowanych donorów maleje i $\rho_d(x, y, z)$ przechodzi w rozkład asymptotyczny $\rho_d^{as}(z)$. Jednak przejście to jest bardzo wolne. Gęstość powierzchniową gazu elektronowego $\sigma_{el}(x, y)$ zamieszczoną na rys. 3.9.a wyznaczyliśmy z zależności:

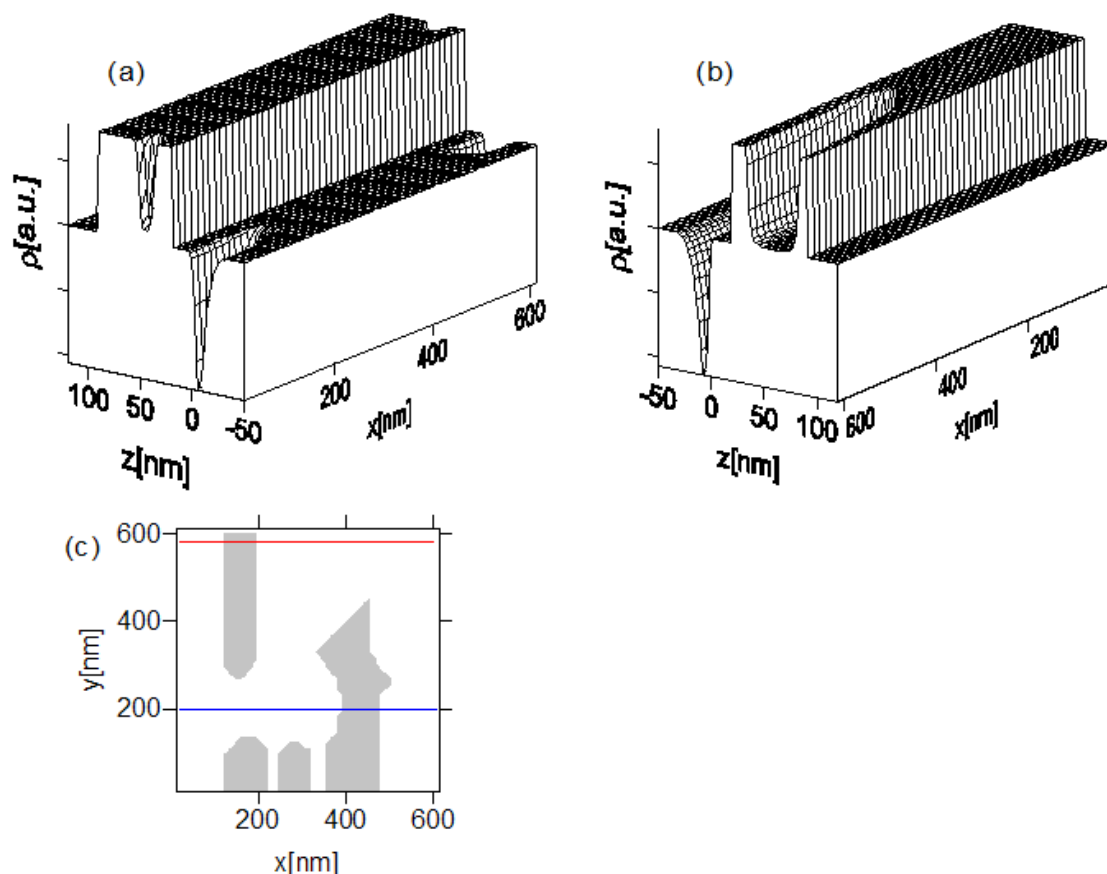
$$\sigma_{el}(x, y) = \int \rho_{el}(x, y, z) dz . \quad (3.29)$$



Rys. 3.9: (a) gęstość powierzchniowa gazu elektronowego $\sigma_{el}(x, y)$, (b) gęstość powierzchniowa ładunku zjonizowanych donorów $\sigma_d(x, y)$. Ciemniejszy kolor odpowiada większej co do modułu gęstości powierzchniowej. Gęstości wyznaczyliśmy dla napięć $V_M = -1.07$ V i $V_R = -0.96$ V.

W odróżnieniu od rozkładu donorów rozkład gazu elektronowego w warstwie GaAs $\sigma_{el}(x, y)$ przechodzi w asymptotyczny w stosunkowo niewielkiej odległości od elektrod w kierunkach $x - y$.

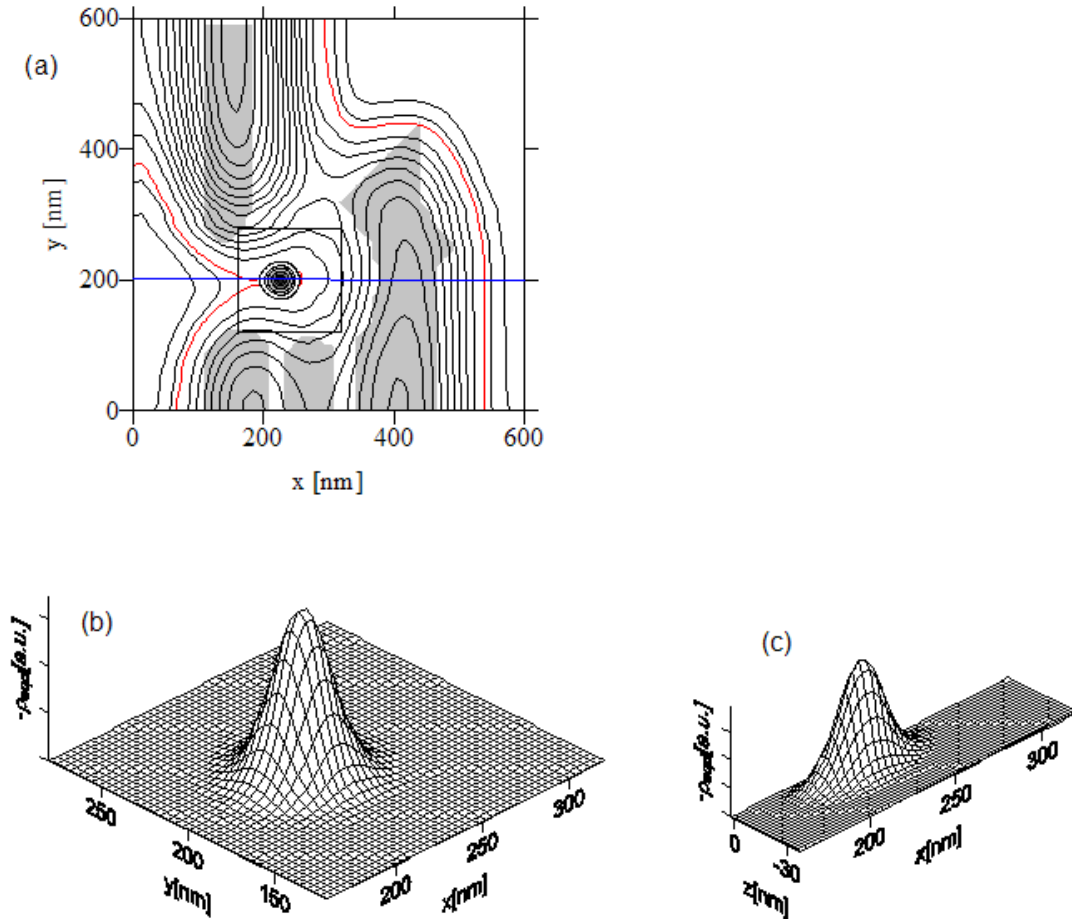
Na rys. 3.10 przedstawiliśmy rozkład ładunku $\rho(x, y_0, z)$ w przekroju płaszczyzną przecinającą obszar kropki $y_0 = 200$ nm (3.10.a) i płaszczyzną przecinającą obszar, w którym rozkład ładunku będzie dążył do asymptotycznego $y_0 = 575$ nm (3.10.b).



Rys. 3.10: Gęstość ładunku $\rho(\vec{r})$ w przekroju płaszczyzną (a) $y = 200$ nm, (b) $y = 575$ nm. Na wykresie (b) osie są przeciwnie skierowane niż osie na wykresie (a). Na rys. (c) zaznaczyliśmy usytuowanie płaszczyzn przekrojów względem elektrod.

Na rys. 3.10.b widzimy, że warstwa zjonizowanych donorów dla dużych x ($x > 400$ nm) rozdziela się na górną (bliżej elektrod) i dolną (bliżej gazu elektronowego). Jonizacja dolnej warstwy jest skutkiem istnienia skoku dna pasma przewodnictwa na styku GaAs z AlGaAs i została opisana wcześniej w podrozdziale 3.4. Rozkłady gazu elektronowego oraz donorów w dolnej warstwie szybko zbiegają do rozkładu asymptotycznego.

Górna warstwa donorów ulega jonizacji pod wpływem ujemnych napięć przyłożonych do elektrod. Pomiędzy zjonizowanymi warstwami donorów znajduje się obszar, gdzie energia potencjalna elektronu jest stała i wynosi E_F .



Rys. 3.11: Gęstość ładunku elektronu uwięzionego w kropce $\rho_{eqd}(x, y, -6 \text{ nm})$ z zaznaczonymi konturami elektrod oraz poziomiami energii potencjalnej $U_{conf}(x, y, z = -6 \text{ nm})$. Kwadratem zaznaczyliśmy obszar, w którym rozwiązywaliśmy równanie Schrödingera. (b) Gęstość ładunku elektronu uwięzionego w kropce $\rho_{eqd}(x, y, -6 \text{ nm})$ w kwadracie z (a) dla $z = -9 \text{ nm}$. (c) Gęstość ładunku elektronu w przekroju płaszczyzną $y = 200 \text{ nm}$ (niebieska linia na (a)).

Trzecim rodzajem ładunku w nanourządzeniu jest ładunek elektronu uwięzionego w kropce $\rho_{eqd}(x, y, z)$. Przekrój $\rho_{eqd}(x, y, -6 \text{ nm})$ dla napięć $V_M = -1.07 \text{ V}$ i $V_R = -0.96 \text{ V}$ zamieściliśmy na rysunku 3.11.a wraz z poziomiami potencjału i konturami elektrod. Na quasi-tójwymiarowym wykresie 3.11.b zamieściliśmy przekrój $\rho_{eqd}(x, y, -9 \text{ nm})$, dla (x, y) tylko z obszaru kropki. Funkcja falowa w kierunkach $x - y$ posiada kształt iloczynu gaussianów.

Brak asymetrii wynikającej z rozkładu potencjału jest przypadkowym wynikiem, spowodowanym zwiększeniem energii w kierunku x przez pole magnetyczne. Na rys. 3.11.c zamieściliśmy przekrój $\rho_{eqd}(x, 200 \text{ nm}, z)$, widzimy że elektron jest przyciągany do bariery i silnie spłaszczony w kierunku z . Maksimum ładunku znajduje się ok. 9 nm poniżej bariery, wartość oczekiwana położenia w kierunku z wynosi ok. 8 nm. Wartość oczekiwana położenia w kierunkach x i y zależy od położenia minimum, czyli od konfiguracji napięć.

3.11 Wpływ ładunku elektronów uwięzionych w kropce na pozostałe ładunki.

W nanostrukturze opisanej w rozdziale drugim obserwowaliśmy silny wpływ liczby elektronów uwięzionych w kropce na rozkład potencjału w nanourządzeniu. Było to spowodowane pojawieniem się na powierzchni metalowej bramki ładunku indukowanego, który był źródłem dodatkowego pola. Efekt ten był uwzględniany poprzez warunki brzegowe narzucone na rozwiązanie równania Poissona. Podobny efekt obserwujemy w nanostrukturze badanej w tym rozdziale.

Ilościowy wpływ ładunku elektronów uwięzionych w kropce $\rho_{eqd}(\vec{r})$ na potencjał uwięzienia wyznaczamy odejmując wartość $U_{conf}(\vec{r}_{qd})$ otrzymaną dla pustej kropki ($N = 0$) od wartości $U_{conf}(\vec{r}_{qd})$ otrzymanej w przypadku, gdy w kropce uwięziony jest jeden elektron ($N = 1$):

$$\Delta U_{conf} = U_{conf}^{N=1}(\vec{r}_{qd}) - U_{conf}^{N=0}(\vec{r}_{qd}), \quad (3.30)$$

gdzie $\vec{r}_{qd} = (220 \text{ nm}, 200 \text{ nm}, -9 \text{ nm})$. Dla napięć $V_M = -1.07 \text{ V}$ i $V_R = -0.96 \text{ V}$ otrzymano $\Delta U_{conf} = -0.41 \text{ meV}$.

Za efekt pogłębienia minimum potencjału w kropce odpowiedzialne są dwa procesy, odepchnięcie gazu elektronowego od obszaru kropki oraz indukowanie ładunku powierzchniowego na metalowych elektrodach. Na pogłębienie minimum nie ma natomiast wpływu proces jonizacji większej liczby donorów.

Wpływ każdego z osobna procesu na głębokość minimum wyznaczyliśmy w sposób przybliżony zakładając, że zachodzi tylko dany proces. Dwa pozostałe zaniedbaliśmy. Za obniżenie $U_{conf}(\vec{r}_{qd})$ po wejściu elektronu do kropki odpowiedzialny jest głównie proces odepchnięcia gazu elektronowego od obszaru kropki, dla rozważanych napięć powoduje on obniżenie $U_{conf}(\vec{r}_{qd})$ o 0.4 meV.

Większy jest wpływ gazu elektronowego z rezerwuaru lewego, który nawet dla niskich napięć V_M znajduje się bliżej kropki. Znacznie mniejszy wpływ na głębokość minimum ma ładunek indukowany na powierzchni metalowych elektrod. Ładunek ten powoduje zmniejszenie $U_{conf}(\vec{r}_{qd})$ o 0.01 meV. Mały wpływ tego efektu spowodowany jest tym, że nanourządzenie dyskutowane w tym rozdziale nie posiada jednej, dużej elektrody, lecz kilka wąskich, położonych daleko od kropki. Wejście elektronu do kropki nie powoduje zmiany rozkładu zjonizowanych domieszek, co tłumaczymy dużą odległością kropki od niezjonizowanych donorów (rys. 3.9.a).

3.12 Podsumowanie.

Wyznaczyliśmy teoretyczny rozkład potencjału elektrostatycznego w modelowej nanostrukturze, której konstrukcja odpowiada w przybliżeniu nanourządzeniu zbudowanemu przez autorów pracy [47]. Obliczenia wykonano korzystając z pierwszych zasad elektrostatyki poprzez rozwiązanie równania Poissona w obszarze roboczym nanourządzenia. Wyznaczyliśmy również rozkłady ładunku gazu elektronowego, zjonizowanych donorów oraz elektronów uwięzionych w kropce. Dzięki temu byliśmy w stanie obliczyć przebieg potencjału poniżej elektrod, stanowiącego potencjał uwięzienia dla kropki kwantowej.

Potencjał uwięzienia ma charakter barier oddzielających minimum globalne, w których zalega gaz elektronowy od minimum lokalnego, w którym tworzy się sztuczny atom. Miejsca o mniejszej wysokości barier stanowią kanały transmisji, przez które mogą tunelować elektrony. Udało nam się wyznaczyć wysokość tych barier w funkcji napięć przyłożonych do elektrod, dzięki czemu mogliśmy określić warunki przechodzenia elektronu z gazu elektronowego do kropki.

Wyliczony rozkład energii potencjalnej dla elektronu został wykorzystany do rozwiązania równania własnego dla układu kilku elektronów uwięzionych w kropce kwantowej. Przebadanie potencjałów elektrochemicznych dla układów 1,2,3 i 4 elektronów w funkcji przyłożonych do elektrod napięć V_M i V_R pozwoliło nam odtworzyć eksperymentalne położenia linii transmisji. Uzyskana doskonała zgodność wyników obliczeń z danymi eksperymentalnymi przekonuje, że możliwe jest teoretyczne przewidzenie właściwości sterowanych napięciowo nanourządzeń półprzewodnikowych.

Zbadaliśmy wpływ ładunku elektronu uwięzionego w kropce na wartości potencjału w jej obszarze. Dodanie jednego elektronu do kropki przesuwa minimum o ok. 0.4 meV, co wynika głównie z odepchnięcia gazu elektronowego od obszaru kropki.

Rozdział 4

Problem Poissona-Schrödingera dla elektronu uwięzionego w studni kwantowej, w sąsiedztwie metalowej elektrody.

4.1 Wprowadzenie.

W dyskutowanych w rozprawie nanourządzeniach potencjał uwięzienia dla elektronów w kropce kwantowej był generowany i regulowany przez napięcia przyłożone pomiędzy kontakt omowy i elektrody położone na powierzchni półprzewodnika. Elektrody stanowią metalowe elementy przewodzące, połączone z rezerwuarami elektronów (uziemione lub połączone ze stabilizatorami napięcia). Ich obecność ma określone skutki dla elektronów znajdujących się w ich pobliżu. Pojawia się efekt oddziaływania elektronu z ładunkiem indukowanym na powierzchni przewodnika. Efekt ten został pokazany w pracy [84], w której dyskutowany jest problem elektronu znajdującego się w studni kwantowej lub we fragmencie drutu kwantowego, położonych w bezpośrednim sąsiedztwie nieskończenie rozległej przewodzącej płaszczyzny.

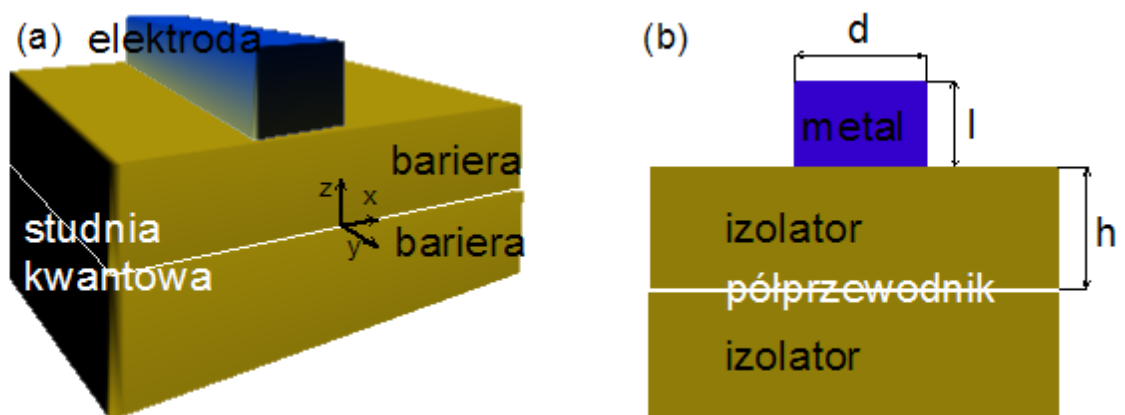
Okazuje się, że potencjał indukowany wynikający z redystrybucji elektronów w przewodniku wywołanej obecnością elektronu w pobliżu jego powierzchni prowadzi do pojawienia się potencjału uwięzienia bocznego, formującego stabilny pakiet falowy. Ten pakiet jest w stanie pokonywać bariery potencjału lub odbijać się od nich z prawdopodobieństwem 100%, podobnie jak elektron w mechanice klasycznej.

W pracy [84] obecność ładunku indukowanego była uwzględniana metodą obrazów, dzięki czemu możliwe było analityczne wyliczenie potencjału indukowanego.

Niestety metoda obrazów stosowalna jest jedynie w przypadku nieskończenie rozległej płaszczyzny przewodzącej. Elektrody znajdujące się w nanourządzeniach posiadają skończone rozmiary i nie ma możliwości analitycznego wyliczenia potencjału indukowanego. Można go natomiast uzyskać rozwiązując równanie Poissona.

Przy rozwiązywaniu równania Poissona obecność metalowych elektrod i wszystkich efektów związanych z ich obecnością jest uwzględniana poprzez narzucenie warunków brzegowych na ich powierzchni (stała, określona wartość potencjału). Ponieważ przy numerycznym rozwiązywaniu problemu Poissona-Schrödingera obliczenia można wykonać dla dowolnego kształtu elektrod, możemy przedyskutować problem, którego nie udaje się rozwiązać analitycznie, a jest ważnym uzupełnieniem pracy [84].

Rozważać będziemy układ, w którym na powierzchni planarnej struktury zawierającej wąską studnię kwantową ułożona jest nieskończenie długa, ale o skończonej szerokości metalowa elektroda. Jest to typowy układ ścieżki prądowej ułożonej na półprzewodnikowej nanostrukturze. Schemat struktury przedstawia rys. 4.1.



Rys. 4.1: Schemat struktury zawierającej studnię kwantową, nad którą znajduje się metalowa elektroda oddzielona od niej izolatorem. (a) schemat quasi-trójwymiarowy, (b) przekrój w płaszczyźnie $x-z$.

Studnia kwantowa oddzielona jest od metalu barierą potencjału, którą stanowi warstwa izolatora lub półprzewodnika o wyżej położonym dnie pasma przewodnictwa. Wybierzmy kartezjański układ współrzędnych, tak jak na rysunku 4.1.a, oś z zorientujmy tak by była prostopadła do warstw półprzewodnikowych, oś y będzie zorientowana równoległe do kierunku ścieżki. Punkt $(0, 0, 0)$ zlokalizowany jest w studni kwantowej ($z = 0$) dokładnie poniżej środka metalowej elektrody ($x = 0$).

Na rys. 4.1.b przedstawiona jest ta sama struktura w przekroju płaszczyzną $y = 0$, z zaznaczonymi wymiarami: odległością metal – studnia kwantowa h , szerokością metalowej elektrody d i jej wysokością l .

4.2 Problem Poissona-Schrödingera.

Założmy teraz, że w studni kwantowej bezpośrednio pod elektrodą znajduje się elektron. Zgodnie z [84] możemy oczekiwać, że w stanie podstawowym układu funkcja falowa elektronu uformuje się w postaci pakietu falowego rozmytego w kierunku poprzecznym (x, y) . Zakładamy, że studnia kwantowa jest na tyle wąska, że elektron w niej zlokalizowany ma zamrożony ruch w kierunku z i problem funkcji falowej elektronu sprowadza się do dwóch wymiarów. Niech stan elektronu w studni kwantowej opisuje funkcja falowa $\psi(x, y)$, wówczas gęstość ładunku elektronu:

$$\rho_e(x, y, z) = -|e|\psi(x, y)|^2 \cdot \delta(z) \quad (4.1)$$

stanowi źródło potencjału elektrostatycznego, który liczymy rozwiązując równanie Poissona uwzględniając w warunkach brzegowych obecność metalowych elektrod:

$$\nabla^2 \varphi_{tot}(\vec{r}) = -\frac{\rho_e(\vec{r})}{\epsilon \epsilon_0} . \quad (4.2)$$

Równanie (4.2) rozwiązujemy na siatce zawierającej w kierunku x i y 91 punktów, w kierunku z 105 punktów. Odległości pomiędzy węzłami siatki zmieniają się w zależności od odległości od centrum struktury, w kierunku x i y wynoszą:

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta = 5 \text{ nm} & \text{dla } |x|, |y| < 150 \text{ nm} \\ \Delta = 10 \text{ nm} & \text{dla } 150 < |x|, |y| < 300 \text{ nm} \end{array} \right. . \quad (4.3)$$

W kierunku z :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Delta_z = 1 \text{ nm} & \text{dla } |z - s| < s + 20 \text{ nm} \\ \Delta_z = 2 \text{ nm} & \text{dla } s + 20 < |z - s| < s + 60 \text{ nm} \\ \Delta_z = 4 \text{ nm} & \text{dla } |z - s| > s + 60 \end{array} \right. , \quad (4.4)$$

gdzie $s = \frac{(h+l)}{2}$. Na powierzchni obszaru objętego powyższą siatką narzucamy na potencjał warunki brzegowe von Neumanna, żądając zerowania się pochodnej normalnej potencjału. Powierzchnię tę stanowią ścianki boczne prostopadłościanu, którego rozmiary wynoszą:

$L_x = 600 \text{ nm}$, $L_y = 600 \text{ nm}$, $L_z = 400 \text{ nm}$. Ponadto w całej objętości metalowej elektrody narzucamy warunki Dirichleta: $\varphi_{tot}(x, y, z) = 0$ dla $|x| < d/2$, $h < z < h+l$, gdzie l jest grubością elektrody, którą w rachunkach przyjęto równą 30 nm .

Szczegóły rozwiązania na siatce równania Poissona (4.2) przedstawione zostały w podrozdziałach 2.3 i 3.5.

Całkowity potencjał elektrostatyczny w układzie stanowi sumę potencjałów pochodzących od ładunku właściwego elektronu $\varphi_e(x, y, z)$ i od ładunku indukowanego $\varphi_{ind}(x, y, z)$:

$$\varphi_{tot}(x, y, z) = \varphi_e(x, y, z) + \varphi_{ind}(x, y, z) . \quad (4.5)$$

Potencjał całkowity $\varphi_{tot}(x, y, z)$ wyznaczamy z równania Poissona, wykorzystując do tego celu opisaną w rozdziale trzecim procedurę numeryczną daną wyrażeniem(3.25).

Potencjał $\varphi_e(x, y, z)$ liczymy z prawa Coulomba:

$$\varphi_e(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int_V \frac{\rho_e(\vec{r}_1)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d^3r_1 . \quad (4.6)$$

Odejmując oba potencjały uzyskujemy potencjał indukowany:

$$\varphi_{ind}(x, y, z) = \varphi_{tot}(x, y, z) - \varphi_e(x, y, z) , \quad (4.7)$$

który stanowi potencjał uwięzienia bocznego dla elektronu w studni kwantowej.

Ostatecznie wyliczamy energię potencjalną uwięzienia bocznego dla elektronu U_{conf} :

$$U_{conf}(x, y) = -|e|\varphi_{ind}(x, y, 0) . \quad (4.8)$$

Wchodzi ona do dwuwymiarowego równania Schrödingera, przy pomocy którego wyznaczamy funkcję falową elektronu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + U_{conf}(x, y) \right] \psi(x, y) = E_{ind}\psi(x, y) . \quad (4.9)$$

4.3 Samouzgodnienie pole-ładunek.

Ponieważ funkcja falowa elektronu zależy od potencjału elektrostatycznego, a on z kolei od rozkładu gęstości elektronowej, obliczenia (4.1) do (4.9) wykonujemy iteracyjnie, aż do uzyskania samouzgodnienia. W pierwszym kroku iteracyjnym przyjmujemy funkcję falową w postaci gaussianu:

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\pi a^2} \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2 - y^2}{2a^2}\right) , \quad (4.10)$$

gdzie x_0 jest odległością maksimum funkcji falowej od środka elektrody, a a - szerokością połówkową pakietu.

Wyznaczywszy rozkład potencjału indukowanego $\varphi_{ind}(x, y, z)$ w przestrzeni wokół elektrody można wyznaczyć ładunek indukowany na jej powierzchni:

$$\sigma_{ind}(\vec{r}) = \varepsilon\varepsilon_0 [-\nabla\varphi_{tot}(\vec{r}) \cdot \vec{n}] , \quad (4.11)$$

gdzie \vec{n} jest wektorem normalnym do powierzchni przewodnika.

Ze względu na nieciągłość pochodnej φ_{tot} na brzegu metalu posłużyliśmy się trójpunktową aproksymacją pochodnej jednostronnej. Zależność na $\sigma_{ind}(x, y, z)$ na dolnej powierzchni elektrody ma postać:

$$\sigma_{ind}(x, y, z) = \varepsilon\varepsilon_0 [-4\varphi(x, y, z - 2\Delta_z) + 3\varphi(x, y, z) + \varphi(x, y, z - \Delta_z)] . \quad (4.12)$$

Dla powierzchni bocznych i górnej używamy podobnego, ale odpowiednio zmodyfikowanego wyrażenia.

4.4 Formowanie kształtu funkcji falowej elektronu znajdującego się poniżej elektrody.

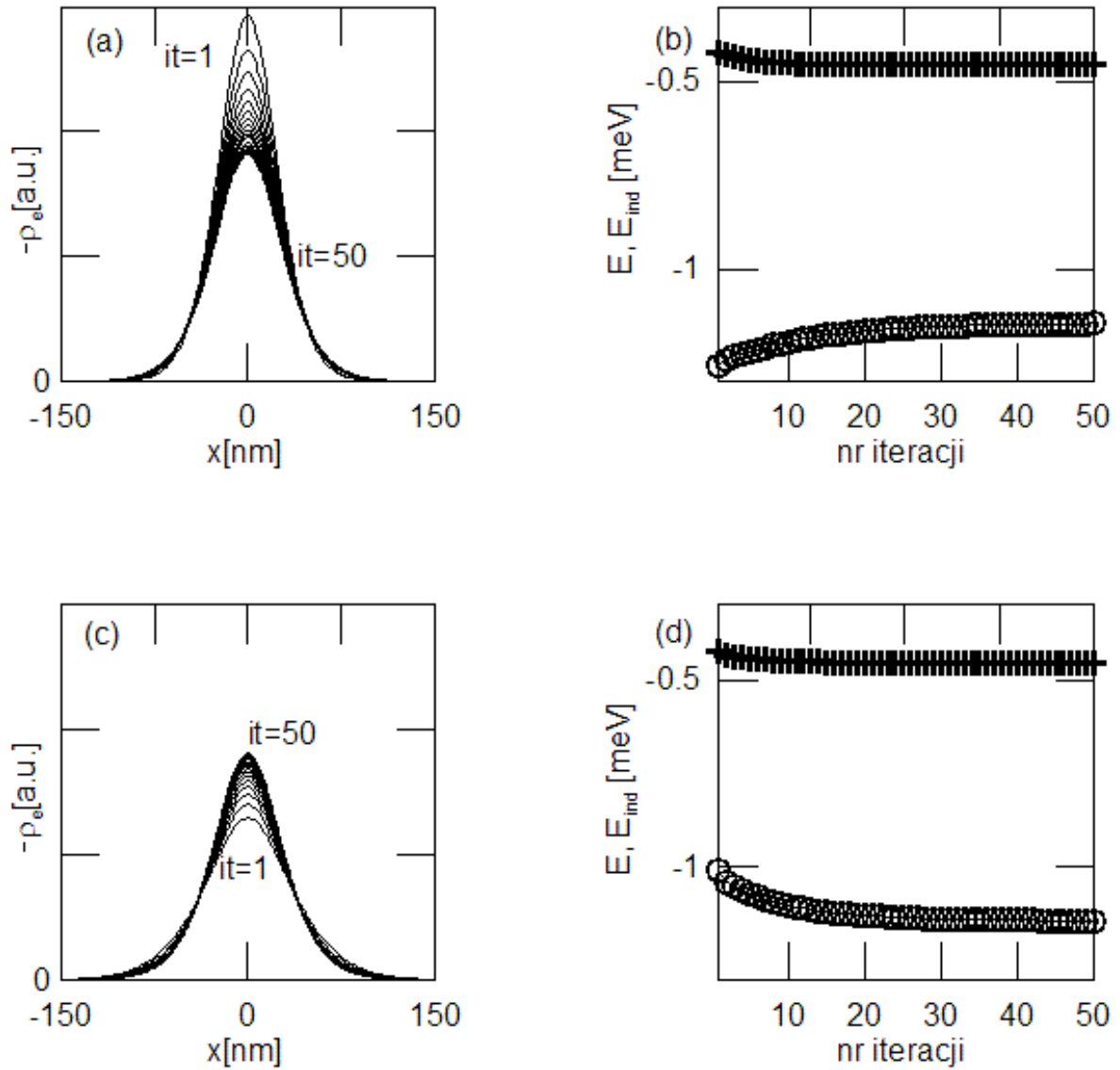
Na rys. 4.2.a i 4.2.c przedstawiono rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x, y = 0)$ w kolejnych iteracjach dla dwóch pakietów początkowych postaci (4.10). Obydwa pakiety początkowe scentrowane są w punkcie $x_0 = 0$, dokładnie poniżej środka elektrody o szerokości $d = 30$ nm, znajdującej się w odległości $h = 20$ nm powyżej studni. Pakiety różnią się szerokością – rys. 4.2.a dotyczy ewolucji startowego pakietu wąskiego ($a = 25$ nm), natomiast rys. 4.2.c szerokiego ($a = 40$ nm). Obok, na rysunkach 4.2.b i 4.2.d zamieszczono energię E_{ind} (okręgi), odpowiednio dla początkowego pakietu wąskiego i dla pakietu szerokiego. Energia ta jest wartością własną występującego w równaniu (4.9) operatora.

Równanie to nie jest jednakże niezależne. Występujący w (4.9) potencjał elektrostatyczny zawiera zależność od funkcji falowej, którą uwzględniamy w procedurze samouzgodnienia. Sytuacja jest analogiczna do jednoelektronowego przybliżenia w układzie wielu ciał, uzyskiwanego w przybliżeniu pola średniego. W tym przypadku wartość własna samouzgodnionego hamiltonianu ma sens „energii jednoelektronowej” [84]. Energia całkowita układu nie jest z nią tożsama, wymaga odjęcia połowy oddziaływania. Dlatego wprowadzamy drugą energię E , która ma sens „energii całkowitej” w rachunku pola średniego i jest zachowana podczas ewolucji czasowej układu [84]:

$$E = E_{ind} - \frac{1}{2} \int U_{conf}(x, y) |\psi(x, y)|^2 dx dy . \quad (4.13)$$

Energia ta ma jednocześnie sens pracy jaką trzeba przekazać elektronowi, aby przenieść go „powoli” (pozwalając na całkowitą relaksację ładunku indukowanego) spod elektrody do nieskończoności. Energia całkowita została przedstawiona na rysunku 4.2.b i 4.2.d krzyżykami.

Pomimo różnego startu, przedstawione na rysunkach 4.2.a,b i 4.2.c,d wielkości zbiegają się w procedurze iteracyjnej do takich samych wartości samouzgodnionych. Jednocześnie energia całkowita w kolejnych iteracjach maleje, co oznacza zbieżność procedury iteracyjnej do stanu podstawowego. Dla rozkładu stabilnego energia całkowita E przyjmuje wartość -0.45 meV podczas gdy jednoelektronowa E_{ind} wynosi -1.14 meV.

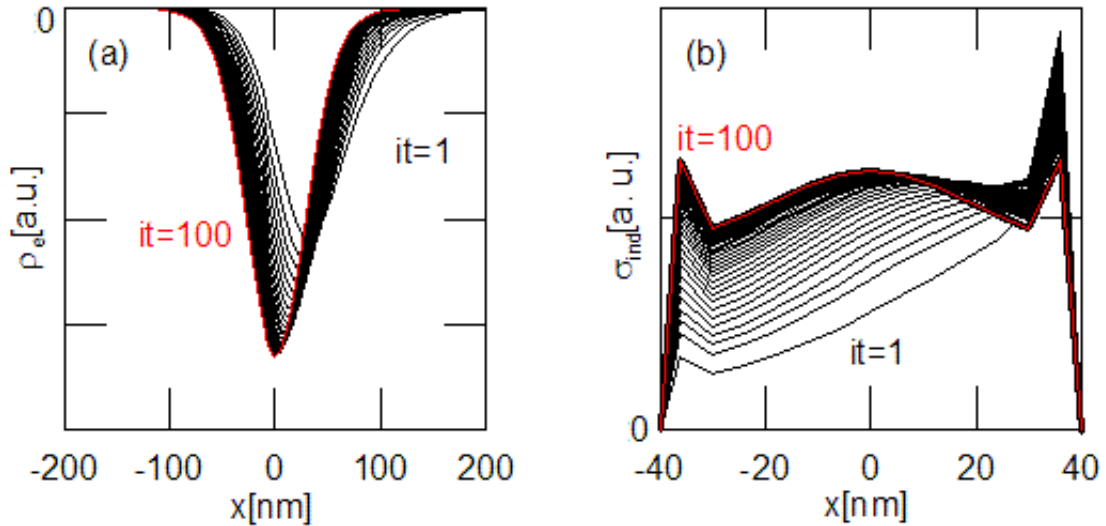


Rys. 4.2: (a,c) Rozkład gęstości ładunku elektronu $\rho_e(x, y = 0)$ w kolejnych iteracjach, (b,d) energia elektronu w kolejnych iteracjach. Okręgami zaznaczono E_{ind} będącą wartością własną równania (4.9), krzyżami energię całkowitą E daną wyrażeniem (4.13). Wykresy a-b wykonano dla założonego w pierwszej iteracji silnie skupionego w przestrzeni konfiguracyjnej pakietu falowego, wykresy c-d dla pakietu rozmytego.

4.5 Badanie lokalnych minimów energii elektronu.

Podobny rachunek wykonaliśmy dla startowego pakietu falowego przyjętego niecentralnie pod elektrodą, a więc dla $x_0 \neq 0$ (4.10). Na rys. 4.3 przedstawiono przebieg samouzgadniania dla pakietu początkowego przesuniętego o wielkość $x_0 = 60$ nm, w układzie, w którym elektroda o szerokości $d = 70$ nm oddalona jest od studni o $h = 20$ nm. Na rysunku 4.3.a przedstawiony jest rozkład gęstości ładunku elektronu (w kierunku x) w kolejnych iteracjach, a na rysunku 4.3.b rozkład gęstości ładunku indukowanego na dolnej powierzchni elektrody. W przeciwieństwie do układu z pakietem o $x_0 = 0$, rozkład ładunku gromadzącego się na powierzchni elektrody wykazuje początkowo asymetrię, gromadzi się go więcej przy krawędzi bliższej elektronu. Ładunek na krawędzi jest duży w porównaniu z pozostałym ładunkiem na elektrodzie, jednak nie na tyle, aby zlokalizować pakiet dokładnie poniżej krawędzi, nawet dla szerokich elektrod.

Pakiet początkowy przesunięty względem środka dąży do takiego samego stanu stabilnego jak pakiet scentrowany w $x_0 = 0$. Obie gęstości zbiegają do rozkładu symetrycznego względem $x = 0$, co oznacza, że w stanie podstawowym wartość oczekiwana współrzędnej x elektronu będzie wynosiła 0 (dokładnie poniżej środka elektrody). Fakt ten jest istotnym wynikiem ponieważ nie jest oczywisty. Zauważmy, że gęstość ładunku indukowanego ma maksima na brzegach elektrody, co wynika z założenia ostrej krawędzi. Przy założeniu łagodniejszej krzywizny powierzchni przewodnika, boczne maksima gęstości ładunku indukowanego obniżą się.



Rys. 4.3: (a) Rozkład ujemnego ładunku elektronu $-\rho_e(x, y = 0)$ w kolejnych iteracjach. (b) rozkład dodatniego ładunku powierzchniowego $\sigma_{ind}(x, y = 0, z = h)$ w kolejnych iteracjach.

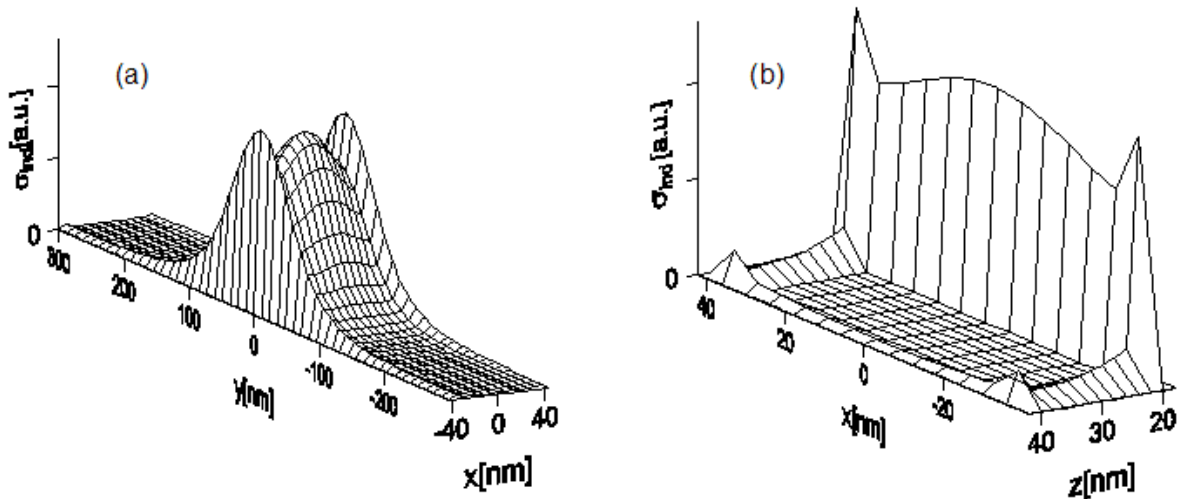
4.6 Rozkłady ładunków i potencjału elektrostatycznego.

Na rys. 4.4.a zaprezentowano rozkład ładunku powierzchniowego indukowanego na elektrodzie $\sigma_{ind}(x, y, z = h)$ dla układu znajdującego się w stanie podstawowym.

Przyjęto odległość elektrody od studni kwantowej stałą i równą $h = 20$ nm.

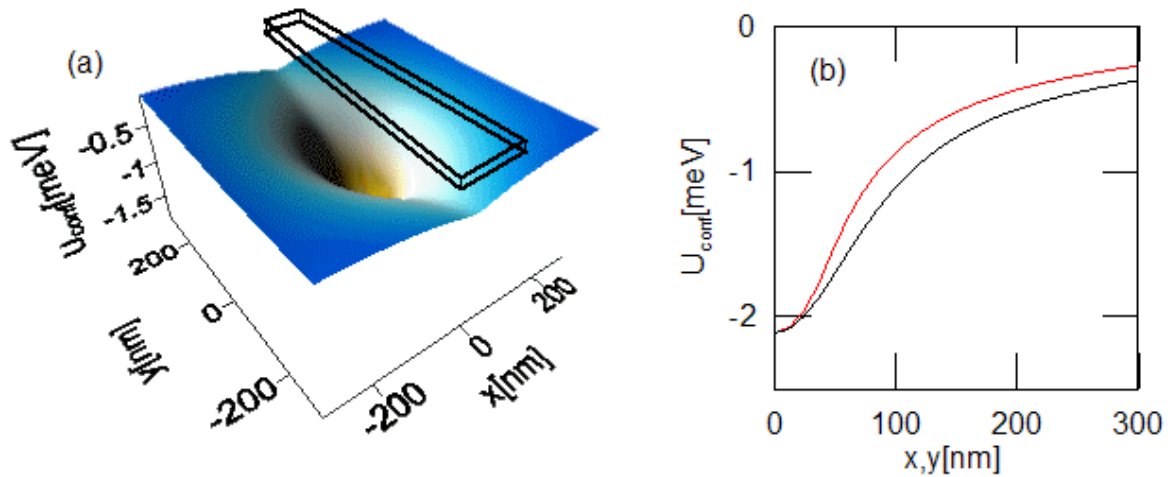
Wyraźnie widać maksimum ładunku $\sigma_{ind}(x, y, h)$ w miejscu powyżej położenia maksimum funkcji falowej elektronu, oraz zanikanie $\sigma_{ind}(x, y, h)$ w miarę oddalania się od płaszczyzny $y = 0$. W kierunku x σ_{ind} przyjmuje największe wartości na krawędziach oraz powyżej położenia elektronu.

Na rys. 4.4.b przedstawiliśmy quasi-trójwymiarowy wykres $\sigma_{ind}(x, y = 0, z)$. Najwięcej ładunku indukuje się na dolnej powierzchni elektrody, na powierzchniach bocznych jest go zdecydowanie mniej. Na ścianie najbardziej oddalonej od studni ładunek jest śladowy.



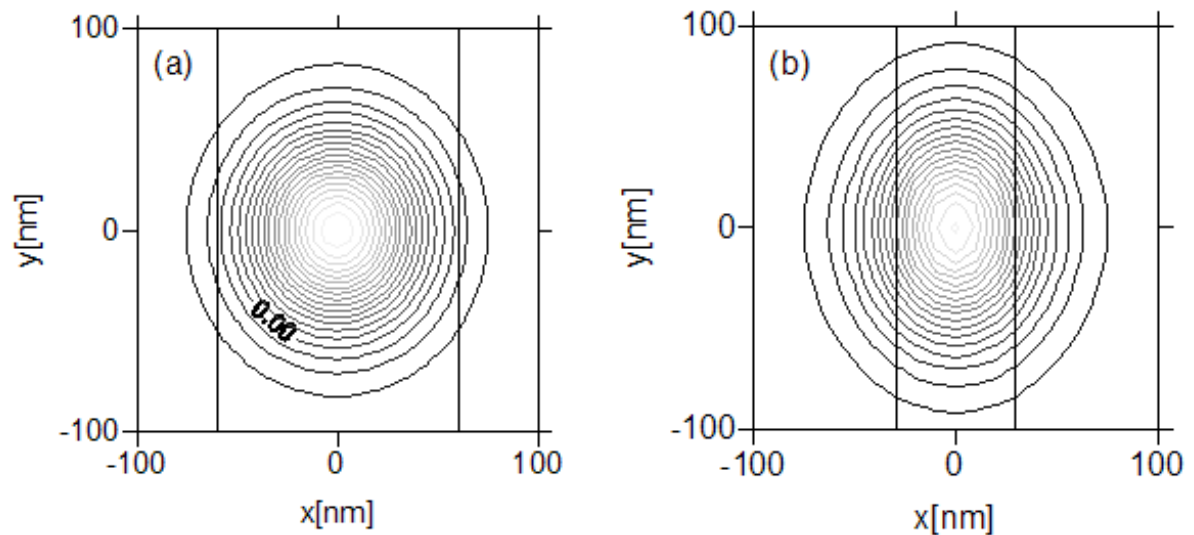
Rys. 4.4: Rozkład ładunku powierzchniowego: (a) na dolnej powierzchni elektrody $\sigma_{ind}(x, y, z = h)$, (b) w przekroju $\sigma_{ind}(x, y = 0, z)$ powyżej elektronu (oś z skierowano do czytelnika, żeby poprawić czytelność wykresu).

Oddziaływanie elektronu z ładunkiem powierzchniowym prowadzi do powstania minimum energii potencjalnej elektronu w studni kwantowej $U_{conf}(x, y)$, której przebieg przedstawiono na rys. 4.5.a. Widoczna jest asymetria, wzdłuż elektrody w kierunku y jama energii potencjalnej jest szersza niż w kierunku poprzecznym do elektrody x . Dla porównania na rys. 4.5.b zamieszczono przebieg $U_{conf}(x, 0)$ i $U_{conf}(0, y)$.



Rys. 4.5: (a) Przebieg energii potencjalnej elektronu $U_{conf}(x, y)$ w studni kwantowej poniżej zaznaczonej schematycznie elektrody metalowej. (b) przebieg energii potencjalnej $U_{conf}(x, 0)$ (linia czerwona) i $U_{conf}(0, y)$ (linia czarna).

Asymetria potencjału uwięzienia ma odzwierciedlenie w asymetrii funkcji falowych uwięzionych elektronów, które przedstawione są na rysunku 4.6.a i 4.6.b. Dla wąskich elektrod efekt jest większy niż dla szerokich, co sprawia, że funkcja falowa elektronu dla małych d będzie bardziej spłaszczona w x -sie niż dla d dużych (rys. 4.6.a-b).



Rys. 4.6: Rozkład ładunku elektronu $\rho_e(x, y)$ w studni dla układu (a) z szeroką elektrodą $d = 60$ nm, (b) z wąską elektrodą $d = 20$ nm.

4.7 Zależność energii od wybranych parametrów geometrycznych nanostruktury.

Wielkość efektu autolokalizacji może być mierzony oboma energiami E i E_{ind} .

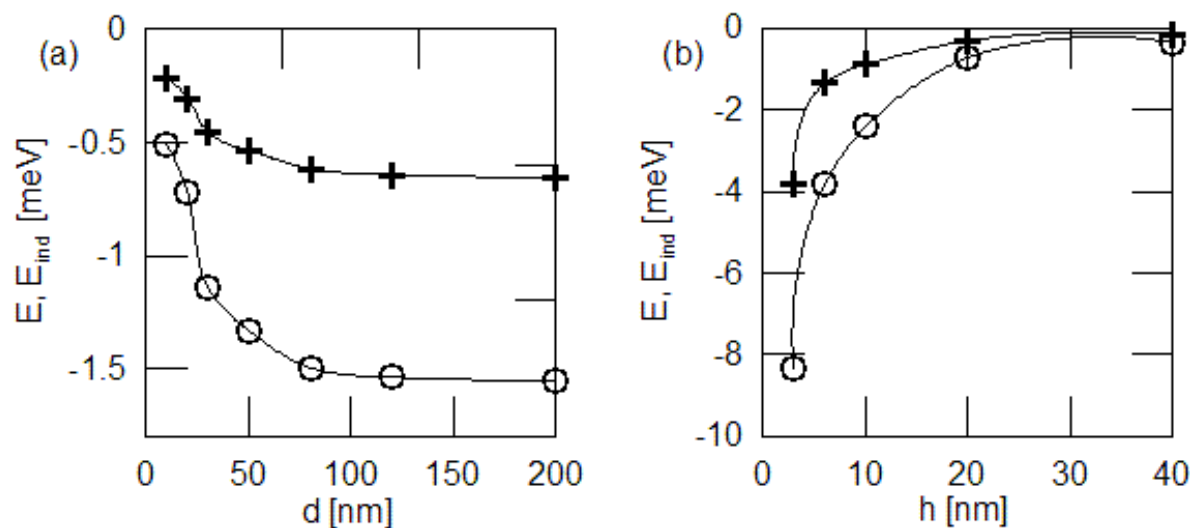
Zależą one między innymi od odległości elektrody od studni kwantowej h i od szerokości elektrody d .

Największą bezwzględną wartość energii uwięzienia pakietu uzyskuje się dla małych d i dużych h .

Na rysunku 4.7.a przedstawiona jest zależność energii E_{ind} oraz E od szerokości elektrody d dla $h = 20$ nm a na rysunku 4.7.b zależność obu energii od odległości studnia - elektrody h dla $d = 30$ nm. Dla $h = 3$ nm i $d = 30$ nm energie osiągają wartości $E = -3.8$ meV i $E_{ind} = -8.3$ meV.

Zauważmy, że energia E_{ind} jest wtedy większa co do bezwzględnej wartości od energii stanu podstawowego elektronu zlokalizowanego na donorze $E_D = -4.7$ meV.

Jest to wynikiem braku przesunięcia energii o energię stanu podstawowego studni kwantowej oraz silnej lokalizacji funkcji falowej w kierunku z , która powoduje znaczny wzrost energii oddziaływania w porównaniu z elektronem rozmytym w trzech wymiarach.



Rys. 4.7: Energia elektronu: okręgi - E_{ind} , krzyże - energia całkowita E , (a) w funkcji szerokości ścieżki d , (b) w funkcji odległości ścieżki od studni h .

Wartości energii E nawet dla dużych d i małych h są małe (rzędu meV). Nawet dla materiałów o dużej masie efektywnej i małej przenikalności dielektrycznej, ewentualna obserwacja elektronu lokalizującego się pod elektrodą, lub wykorzystanie tego zjawiska w nanoelektronice możliwe będzie tylko w bardzo niskich temperaturach.

4.8 Podsumowanie i wnioski.

Elektron znajdujący się w studni kwantowej poniżej metalowej elektrody na skutek oddziaływania z ładunkiem indukowanym na jej powierzchni ulega uwięzieniu tworząc pakiet falowy z energią wiązania rzędu kilku meV. Oddziaływanie z ładunkiem indukowanym nie pozwala na oddalenie się elektronu od elektrody. Jego ruch w kierunku poprzecznym jest zatem niemożliwy (w przyjętej geometrii układu jest nim kierunek x). Przesunięcie elektronu w kierunku wzdłuż elektrody (tutaj y) nie oddala go od powierzchni przewodnika. W tym kierunku może się poruszać i oczekujemy, że będzie posiadał właściwości opisane w pracy [84].

Swoboda ruchu tylko w jednym wymiarze jest własnością drutu kwantowego. Przewidujemy zatem pojawienie się pod elektrodą „indukowanego drutu kwantowego”, który „zwykłym” drutem kwantowym nie jest. Różnica polega na braku rozmycia elektronu w kierunku ruchu y . W drucie kwantowym funkcja falowa elektronu w kierunku y jest falą płaską. W indukowanym drucie kwantowym elektron powinien poruszać się w postaci stabilnego pakietu falowego, który może tunelować przez bariery potencjału lub odbijać się od nich z prawdopodobieństwem 100% (analogicznie jak elektron klasyczny). Te własności dają możliwość wykorzystania kanału tworzącego się poniżej elektrod jako elektronowodu. W połączeniu z przedstawioną w pracy [84] możliwością kontrolowania transmisji elektronu to zjawisko oferuje możliwość precyzyjnego sterowania pojedynczymi elektronami. Te cechy czynią rozpatrywaną strukturę obiecującym elementem komputera kwantowego, służącym do rozprowadzania elektronów pomiędzy różnymi obszarami układu bramek logicznych.

Rozdział 5

Dyskusja wyników i wnioski.

Zasadniczym przedmiotem badań teoretycznych prowadzonych w niniejszej rozprawie były tzw. elektrostatyczne kropki kwantowe tworzone w nanourządzeniach półprzewodnikowych. W rozpatrywanych kropkach kwantowych potencjał uwięzienia dla elektronów w nich schwytych stanowi potencjał pola elektrostatycznego. Jego rozkład można zmieniać regulując napięcia przyłożone do elektrod stanowiących część nanourządzenia. Pozwala to wpływać na własności wytworzonych w nich sztucznych atomów. Możliwość sterowania powoduje, że tego typu układy mogą znaleźć liczne zastosowania w elektronice i aktualnie stanowią przedmiot intensywnych badań eksperymentalnych.

Rozpatrywane nanostruktury są tak skonstruowane, aby po przyłożeniu napięć pracy do odpowiednio ukształtowanych na powierzchni nanostruktury metalowych elektrod wytworzyła się w materiale półprzewodnikowym kropka kwantowa.

Ładunek na powierzchni elektrod powstający po przyłożeniu napięć pracy wymusza rozkład potencjału elektrostatycznego w całym nanourządzeniu. On z kolei decyduje o rozkładach pozostałych ładunków znajdujących się w nim: zjonizowanych donorów, dwuwymiarowego gazu elektronowego oraz elektronów uwięzionych w kropce kwantowej. Ładunki te wraz z ładunkiem na powierzchni elektrod są źródłem potencjału w całym nanourządzeniu, w szczególności potencjału uwięzienia w kropce kwantowej, stanowiącej przedmiot badań.

Ze względu na wzajemną zależność rozkładów potencjału oraz ładunków w całym nanourządzeniu, przy ich wyznaczaniu trzeba rozwiązać problem Poissona-Schrödingera z zależnym od rozkładu potencjału rozkładem źródeł pola i warunkami brzegowymi zadanymi na powierzchni otaczającej obszar obliczeń. W tym celu zastosowaliśmy numeryczną, samouzgodnioną metodę rachunkową.

Całkowity potencjał elektrostatyczny rozdzieliliśmy na dwie części ze względu na różną rolę jaką spełniają one w nanourządzeniu. Część pierwsza, której źródłem są: ładunek powierzchniowy indukowany na elektrodach, ładunek zjonizowanych donorów oraz ładunek dwuwymiarowego gazu elektronowego wyznaczyliśmy rozwiązując równania Poissona. W obszarze kropki kwantowej ta część potencjału stanowi potencjał uwięzienia będący dla elektronów w kropce potencjałem zewnętrznym.

Część drugą potencjału, generowaną przez ładunek uwięzionych w kropce elektronów wyznaczamy z prawa Coulomba i wykorzystujemy przy wyznaczeniu rozkładu ładunków stanowiących źródło pierwszej części potencjału oraz warunku brzegowego dla równania Poissona.

Rozkład zjonizowanych donorów wyznaczamy przyjmując, że jonizacja zachodzi, gdy energia potencjalna elektronu liczona względem poziomu Fermiego w miejscu donora jest wyższa od energii wiązania donora. Rozkład dwuwymiarowego gazu elektronowego wyznaczamy z warunku, że gaz gromadzi się tylko tam, gdzie istnieją nieobsadzone elektronowe poziomy energetyczne niższe od energii Fermiego. Zarówno energia elektronu zlokalizowanego na donorze, jak i energia elektronu w gazie elektronowym zależą od całkowitego potencjału elektrostatycznego w nanourządzeniu.

Warunek brzegowy narzucony na rozwiązanie równania Poissona określa pośrednio rozkład ładunku indukowanego na powierzchni elektrod.

Rozkład ładunku elektronów uwięzionych w kropce wyznaczamy z modułu funkcji falowej, którą wyliczamy rozwiązując równanie Schrödingera dla układu N elektronów znajdujących się w jamie zewnętrznego potencjału, którą stanowi wyliczany przez nas potencjał uwięzienia. Wyznaczone z równania Schrödingera energie układu uwięzionych elektronów stanowią wielkości, które posłużyły do odtwarzania wyników eksperymentalnych – położenia linii transmisji w funkcji przyłożonych do elektrod napięć lub pola magnetycznego w układzie.

W rozdziale drugim, korzystając z przedstawionej metody rachunkowej, przebadaliśmy nanostrukturę dwuelektrodową przedstawioną w pracy [83]. W tym nanourządzeniu potencjał uwięzienia bocznego jest generowany przez napięcia przyłożone pomiędzy elektrodę dolną - podłoże i elektrodę górną – bramkę, posiadającą kształt cylindrycznego kapelusza z szerokim rondem i niskim kapturkiem. Boczna część bramki - rondo znajduje się bliżej dolnej elektrody (podłoża) niż centrum - kapturek. Dzięki temu energia potencjalna elektronu przyjmuje najmniejsze wartości bezpośrednio poniżej środka kapturek.

Układ warstw półprzewodnikowych znajdujący się pomiędzy elektrodami powoduje, że poniżej kapturka powstają dwa minima oddzielone od siebie barierą tunelową: pierwsze – położone bliżej bramki, drugie – położone bliżej podłoża. Elektron może być uwięziony w jednym z nich: dla niskiego (bardziej ujemnego) napięcia przyłożonego na bramkę w minimum bliższym podłoża, dla napięć wyższych (mniej ujemnych) bliżej bramki. Tunelowanie pomiędzy kropkami zachodzi przy bardzo małej zmianie napięcia przyłożonego do bramki (rzędu 1 mV). Napięcie tego rzędu stanowi amplitudę składowej zmiennej napięcia przyłożonego do bramki, służącej do wymuszania przejścia elektronu przez barierę tunelową. Obserwowany w eksperymencie sygnał pojemnościowy pochodzi zatem od przejścia elektronu pomiędzy dwiema sprzężonymi kropkami kwantowymi. Wynik ten jest dość istotny, ponieważ autorzy pracy [83] interpretują go jako przejścia pomiędzy kropką a rezerwuarem elektronów. Zgodnie z naszymi obliczeniami przejście to zachodzi dopiero przy zmianie napięcia większej o rząd wielkości i nie jest obserwowane w postaci ostrego pików pojemnościowego.

W zastosowanym do interpretacji danych eksperymentalnych [83] modelu teoretycznym większość parametrów nanourządzenia można było przyjąć zgodnie z danymi podanymi przez jego konstruktorów. Dwa parametry układu nie wyznaczone w eksperymencie z wystarczającą dokładnością musiały zostać dopasowane do danych eksperymentalnych. Parametrami dopasowania są: promień wewnętrzny kapturka R i nieskompensowana gęstość donorów n_d . Zostały one wykorzystane do odtworzenia położenia dwóch pików pojemnościowych widzianych w eksperymencie – pierwszego i ostatniego (dwudziestego). Po dobraniu obu parametrów przebadane zostało położenie dwóch pierwszych pików pojemnościowych w funkcji pola magnetycznego. Ich przebiegi eksperymentalne zostały dobrze odtworzone bez dalszych parametrów dopasowania. W szczególności z dużą dokładnością odtworzone zostało przejście singlet – tryplet dla układu dwóch elektronów w polu magnetycznym. Jest to silna przesłanka świadcząca o poprawności modelu teoretycznego.

Uzyskana metoda rachunkowa została zastosowana do przebadania przebiegu energii potencjalnej elektronu wewnątrz studni kwantowej poniżej bramki. Minimum tej energii powstaje poniżej środka kapturka – na osi symetrii prostopadłej do elektrod. Wraz z oddalaniem się od osi symetrii w kierunku równoległym do płaszczyzn elektrod potencjał rośnie: przy osi powoli, w odległości równej promieniowi kapturka najszybciej, a dla dużych odległości, rzędu 1.2 – 2 promieni kapturka wzrost energii potencjalnej nasycy się i asymptotycznie zmierza do stałej, maksymalnej wartości.

Z rachunku wynika, że kształt potencjału uwięzienia pomiędzy osią symetrii a obszarem jego maksymalnych wartości zależy od wielkości promienia kapturka. Dla małych promieni, mniejszych od 100 nm przebieg potencjału jest zbliżony do funkcji Gaussa. Idealny gaussian uzyskaliśmy dla promienia 70 nm. Dla kapturek bardzo dużych, większych od 500 nm, potencjał posiada przebieg zbliżony do prostokątnej studni potencjału. W minimum jest prawie stały, a w odległości równej promieniowi kapturka gwałtownie rośnie do wartości maksymalnej. Dla kapturek o promieniu 100 – 150 nm potencjał w minimum na dużym obszarze posiada przebieg dobrze przybliżony parabolą.

Parabolę, którą przybliżamy energię potencjalną w minimum opisujemy dwoma parametrami – jej wartością w minimum i współczynnikiem krzywizny. Współczynnik krzywizny, który zależy tylko od promienia kapturka ma decydujący wpływ na wartość energii wzbudzenia stanu jednoelektronowego. Korzystna dla zastosowań nanourządzenia jest możliwie największa jej wartość, ponieważ decyduje ona o rozdzielczości spektroskopii pojemnościowej. Okazuje się, że energia wzbudzenia bardzo słabo zależy od większości czynników decydujących o potencjale uwięzienia. W funkcji napięcia bramki, jest prawie stała, w funkcji liczby uwięzionych cząstek oraz w funkcji gęstości domieszek donorowych n_d rośnie bardzo wolno. Parametrem decydującym o jej wartości jest promień kapturka R , od którego silnie zależy. Zależność ta jest nieliniowa i niemonotoniczna. Energia wzbudzenia osiąga maksymalną (najkorzystniejszą) wartość równą 6.9 meV dla promienia kapturka 70 nm i maleje do zera zarówno gdy promień kapturka dąży do zera, jak i do wartości makroskopowych. Zadając podczas procesu produkcyjnego odpowiedni rozmiar kapturka można uzyskać odpowiednią energię wzbudzenia oraz kształt potencjału uwięzienia, a tym samym wymagane elektroniczne własności urządzenia.

Sterowanie nanourządzeniem uzyskuje się dzięki zależności wartości energii potencjalnej w minimum od napięcia przyłożonego pomiędzy bramkę i podłoże. Okazuje się, że wraz z wzrostem napięcia położenie minimum obniża się liniowo. Możliwość przesuwania położenia minimum energii potencjalnej elektronu w kropce kwantowej względem energii Fermiego pozwala na zmianę liczby elektronów uwięzionych w kropce kwantowej i formowanie różnych sztucznych atomów. Energia Fermiego jest określona przez najwyższej położone poziomy energetyczne rezerwuaru elektronów od strony podłoża.

Na położenie minimum energii potencjalnej ma również wpływ liczba elektronów uwięzionych w kropce. Uwięzione elektrony powodują indukowanie się na powierzchni metalowej bramki dodatniego ładunku, co z kolei prowadzi do obniżenia potencjału uwięzienia. Minimalna wartość energii potencjalnej zależy od liczby elektronów uwięzionych w kropce również liniowo.

Uzyskana zgodność wyników obliczeń z danymi eksperymentalnymi dla dwuelektrodowej kropki kwantowej o symetrii cylindrycznej zachęciła nas do zamodelowania i przebadania bardziej skomplikowanej struktury wieloelektrodowej, skonstruowanej i przebadanej eksperymentalnie w laboratorium TU Delft w Holandii [47].

Nanourządzenie to zostało zbudowane na bazie nieco innej struktury planarnej, niż omówiona powyżej. Na podłożu z GaAs umieszczona jest warstwa AlGaAs stanowiąca dla elektronu schodek energii potencjalnej. Warstwa AlGaAs zawiera domieszki donorowe. Na powierzchni struktury (AlGaAs) umieszczone są cztery metalowe elektrody. W obszarze asymptotycznym znajdującym się w dużej odległości od elektrod, elektrony opuszczają stany donorowe w AlGaAs przechodząc do niżej położonego pasma przewodnictwa GaAs. Na skutek przyciągania przez opuszczone dodatnie centra donorowe elektrony pozostają poniżej schodka potencjału tworząc dwuwymiarowy gaz elektronowy.

Po przyłożeniu do elektrody napięcia ujemnego względem podłoża pojawia się dodatkowe pole elektrostatyczne, które powoduje dodatkową jonizację donorów w pobliżu elektrody, oraz wypchnięcie gazu elektronowego z obszaru znajdującego się bezpośrednio pod nią. Przez odpowiedni dobór liczby elektrod, ich kształtu i przyłożonych do elektrod napięć, poniżej układu elektrod, tuż pod stopniem potencjału pojawia się jama potencjału, w której mogą zostać uwięzione elektrony tworząc sztuczny atom.

Obecność elektronów w jamie potencjału wpływa na rozkład zjonizowanych donorów i elektronów w dwuwymiarowym gazie elektronowym otaczającym sztuczny atom. Problem Schrödingera - Poissona dla tego nanourządzenia należało rozwiązać również w sposób samouzgodniony. Tym razem, w odróżnieniu od poprzednio omówionego nanourządzenia, układ nie posiada żadnej symetrii. Rachunki musiały być wykonane na trójwymiarowej siatce przestrzennej w układzie współrzędnych kartezjańskich. Kroki siatki w trzech kierunkach przestrzennych wybrano w sposób pozwalający uwzględnić wszystkie szczegóły geometrii nanourządzenia. Ponieważ eksperyment z użyciem opisywanego nanourządzenia wykonany był w silnym polu magnetycznym, należało jego obecność również uwzględnić.

W pierwszym kroku rachunkowym został rozwiązany problem asymptotyczny, a więc znaleziony został rozkład potencjału, rozkład ładunku zjonizowanych donorów i dwuwymiarowego gazu elektronowego w polu magnetycznym. Rozwiązanie to pozwoliło zamodelować zmianę rozkładu gęstości gazu elektronowego w pobliżu wygenerowanej poniżej elektrod kropki kwantowej. Następnie wyznaczyliśmy rozkłady potencjału elektrostatycznego, ładunku gazu elektronowego i zjonizowanych donorów oraz uwięzionych w kropce kwantowej elektronów w roboczej części nanourządzenia.

Szczególnie istotny jest przebieg potencjału poniżej elektrod, stanowiącego potencjał uwięzienia dla elektronów tworzących sztuczny atom. Znając potencjał uwięzienia można było rozwiązać problemy własne układów złożonych z jednego lub kilku elektronów uwięzionych w kropce kwantowej, wyliczyć ich energie całkowite, a z nich potencjały elektrochemiczne sztucznych atomów.

Minimum potencjału uwięzienia, w którym tworzy się kropka kwantowa jest oddzielone barierami potencjału od obszarów, w których zalega gaz elektronowy. Miejsca o mniejszej wysokości barier mogą stanowić kanały transmisji, przez które tunelują elektrony. Wyznaczyliśmy wysokość tych barier dla napięć pracy, dzięki czemu mogliśmy określić drogę, którą elektrony przechodzą z gazu elektronowego do kropki.

Ponieważ w nanourządzeniu [47] znane były wszystkie jego parametry geometryczne, jedynym parametrem, który musiał być dopasowany do danych doświadczalnych była gęstość nieskompensowanych domieszek donorowych w warstwie barierowej (AlGaAs). Parametr ten został tak dobrany, żeby przy takich samych jak w eksperymencie wartościach napięć przyłożonych do elektrod uzyskać transmisję pierwszego elektronu przez stanowiące lewy kanał transmisji obniżenie bariery, oddzielającej kropkę kwantową od bocznego rezerwuaru elektronów (dwuwymiarowego gazu elektronowego). Po dobraniu jedynego nieznanego parametru teorii można było przebadać własności generowanych w kropce kwantowej sztucznych atomów w funkcji przyłożonych do elektrod napięć. Obliczyliśmy potencjały elektrochemiczne układów 1-4 elektronów w funkcji napięć przykładanych do elektrod. To pozwoliło wyznaczyć teoretycznie położenia linii transmisji, które były obserwowane eksperymentalnie i podane w pracy [47].

Uzyskane wyniki obliczeń zgadzają się bardzo dobrze z wynikami eksperymentu. Z dużą dokładnością odtwarzane są położenia wszystkich wyliczonych linii transmisji, ich wzajemne odległości i nachylenia. Odtworzyliśmy również otwieranie się i zamykanie dwóch możliwych kanałów transmisji elektronów.

Zbadaliśmy zjawisko pogłębiania minimum potencjału elektrostatycznego przez ładunek uwięzionych w kropce elektronów. Jest ono znacznie słabsze niż dla nanostruktury dwuelektrodowej i wynosi około 0.4 meV dla pojedynczego elektronu. Pogłębienie spowodowane jest głównie przez odepchnięcie gazu elektronowego od kropki, natomiast zmiana ładunku na powierzchni metalowych elektrod jest zanedbywalnie mała, ze względu na ich niewielki rozmiar i duże oddalenie od kropki.

Dysponując oprogramowaniem pozwalającym na rozwiązanie problemu Poissona - Schrödingera w układach nie posiadających żadnej symetrii przestrzennej można było przebadać zjawisko autolokalizacji elektronu w pobliżu metalowych elektrod umieszczonych na strukturze półprzewodnikowej. Ten interesujący efekt został opisany analitycznie w układzie, w którym metalowa elektroda tworzyła nieskończoną płaszczyznę i możliwe było rozwiązanie problemu Poissona metodą obrazów [84]. Podobny efekt powinien wystąpić również w przypadku typowych elektrod o skończonych rozmiarach ale jego opis wymaga rachunków numerycznych.

Do badań wybraliśmy nanostrukturę składającą się ze studni kwantowej, powyżej której biegnie nieskończenie długa, ale o skończonej szerokości i wysokości metalowa elektroda, stanowiąca ścieżkę prądową. Pomiedzy ścieżką a studnią znajduje się warstwa izolatora.

Znajdujący się w studni kwantowej elektron, którego funkcja falowa jest uformowana w postaci pakietu falowego o skończonych rozmiarach, powoduje pojawienie się na powierzchni metalowej elektrody ładunku indukowanego. Ładunek ten jest źródłem potencjału, który wpływa na kształt funkcji falowej elektronu. Rozwiązanie problemu wymaga zastosowania samouzgodnionej procedury iteracyjnej, takiej samej jaka służyła do opisu nanourządzenia [47]. Funkcja falowa elektronu uformowana w sposób dowolny w pierwszym kroku iteracyjnym, w kolejnych krokach iteracyjnych zmierza do postaci, dla której energia elektronu jest minimalna, czyli jest realizowany stan podstawowy układu.

Dzięki przeprowadzonym obliczeniom pokazano, że elektron w stanie podstawowym lokalizuje się dokładnie poniżej środka elektrody, pomimo że globalne maksima potencjału (minima energii potencjalnej elektronu) pojawiają się pod jej krawędziami. Maksima te są jednak stosunkowo wąskie. Rozkład gęstości ładunku elektronu uzależniony jest od szerokości elektrody. Dla wąskich elektrod widoczna będzie duża asymetria w rozkładzie ładunku powierzchniowego, która skutkować będzie asymetrią potencjału uwięzienia i rozkładu ładunku uwięzionego elektronu. Elektron będzie spłaszczony w kierunku poprzecznym do elektrody.

Elektron będzie mógł poruszać się swobodnie w kierunku podłużnym, równoległe do elektrody, ruch w kierunku poprzecznym będzie wymagał pokonania energii autolokalizacji. Poniżej elektrody pojawi się zatem indukowany drut kwantowy. Wartość energii autolokalizacji elektronu będzie maleć wraz z oddalaniem elektronu od powierzchni elektrody i rosnać przy zwiększaniu jej szerokości.

Dla bardzo szerokich elektrod i wąskich warstw izolatora energia ta jest rzędu 1 meV, zatem ewentualne praktyczne wykorzystanie tej struktury będzie możliwe w bardzo niskich temperaturach.

5.1 Podsumowanie.

W rozprawie opracowana została metoda obliczeniowa pozwalająca na teoretyczne wyliczenie przebiegu potencjału elektrostatycznego w nanourządzeniach stanowiących realne eksperymentalne konstrukcje. Uzyskane rozkłady potencjału umożliwiły symulację najistotniejszych zjawisk zachodzących w kropkach kwantowych i przebadanie wpływu parametrów nanourządzenia na ich własności.

Opracowana metoda pozwala na teoretyczne planowanie i modelowanie kropek kwantowych o zadanych własnościach.

Szczegółowo przebadano trzy wybrane nanostruktury półprzewodnikowe. Pierwsza z nich została wykorzystana w pracach eksperymentalnych [37–40,83]. Ma ona symetrię cylindryczną, dzięki czemu czasochłonne obliczenia potencjału elektrostatycznego redukują się do dwóch zmiennych w cylindrycznym układzie współrzędnych.

Zdobyte przy badaniu tej struktury doświadczenie pozwoliło na przebadanie nanourządzenia [47] nie posiadającego symetrii i wymagającego wykonania obliczeń w jawnie trójwymiarowej przestrzeni.

Opracowane w tym celu oprogramowanie zostało wykorzystane do przebadania własności trzeciej konstrukcji, która stanowi drut kwantowy indukowany poniżej ścieżki prądowej ułożonej na nanostrukturze zawierającej studnię kwantową.

Rozdział 6

Dodatek.

6.1 Metoda rozwiązywania równania Schrödingera dla stanów jednoelektronowych.

Równanie Schrödingera dla pojedynczego elektronu w zewnętrznym potencjale uwięzienia

$$h\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}) . \quad (6.1)$$

rozwiązujemy metodą „ewolucji w czasie urojonym” (ang. Imaginary Time Step - ITS) [90]. Celem rachunku jest wyznaczenie wartości własnych ϵ_i i funkcji własnych $\psi_i(\vec{r})$ niezależnego od czasu hamiltonianu h . Funkcje $\psi_i(\vec{r})$ wyznaczone są w kolejności rosnącej odpowiadających im energii własnych ϵ_i . Najpierw wyznaczany jest stan podstawowy, potem kolejne stany wzbudzone. i -ty stan wzbudzony wyznaczamy po wcześniejszym wyznaczeniu wszystkich $i - 1$ stanów o niższej energii.

Schemat algorytmu do wyznaczenia ψ_i i ϵ_i ma postać:

1. W zerowej iteracji nadajemy wartości funkcji $\phi^0(\vec{r})$ na siatce punktów przy pomocy generatora liczb pseudolosowych.
2. Wyznaczamy funkcję $f(\vec{r})$ na całej siatce

$$f(\vec{r}) = h\phi^j(\vec{r}) . \quad (6.2)$$

3. Wyznaczamy funkcję $\phi^{j+1}(\vec{r})$:

$$\phi^{j+1}(\vec{r}) = \phi^j(\vec{r}) - \Delta\tau f(\vec{r}) , \quad (6.3)$$

gdzie $\Delta\tau$ jest małym przedziałem w czasie urojonym (parametrem iteracyjnym).

4. Normalizujemy $\phi^{j+1}(\vec{r})$ i wyznaczamy energię

$$\epsilon_i^{j+1} = \langle f(\vec{r}) | \phi^{j+1}(\vec{r}) \rangle . \quad (6.4)$$

5. Ortogonalizujemy $\phi^{j+1}(\vec{r})$ do funkcji falowych elektronu we wszystkich stanach $\psi_0(\vec{r}) \dots \psi_{i-1}(\vec{r})$ posiadających niższą energię:

$$\phi^{j+1}(r) = \phi^{j+1}(\vec{r}) - \sum_{i=0}^{N-1} \langle \phi^{j+1}(\vec{r}) | \psi_i(\vec{r}) \rangle \psi_i(\vec{r}) . \quad (6.5)$$

6. Jeżeli $|\epsilon_i^{j+1} - \epsilon_i^j|$ nie jest wystarczająco małe wracamy do punktu 2. W przeciwnym wypadku kończymy procedurę przyjmując $\psi_i(\vec{r}) = \phi^j(\vec{r})$ i $\epsilon_i = \epsilon_i^{j+1}$.

Metoda ITS działa bardzo dobrze zarówno w problemach jedno- jak i niebanalnych dwu- i trój-wymiarowych. Przyjmijmy, że n oznacza liczbę punktów siatki, a k ilość potrzebnych nam wektorów i wartości własnych macierzy h . W naszych problemach wartości $k \sim 10$ a n są rzędu 10^4 . W przypadku bibliotecznych metod diagonalizacji macierzy [91] potrzebna jest do obliczeń pełna macierz h zawierająca n^2 elementów, a do obliczeń metodą ITS jedynie $(k+2)n$ elementów (na funkcje $\psi_i(\vec{r})$, $\phi(\vec{r})$ oraz $f(\vec{r})$). Złożoność obliczeniowa dla metod bibliotecznych jest bardzo duża rzędu $O(n^4)$, podczas gdy dla ITS $O(k^3 n \ln n)$. Przedstawiony powyżej algorytm ma charakter ogólny, przypadki szczególne różnią się postacią hamiltonianu h i funkcji $f(\vec{r})$. W najbardziej ogólnym przypadku układ nie posiada symetrii przestrzennej i zarówno hamiltonian jak i funkcje własne będą funkcjami trzech zmiennych. Rozważmy przykładowy układ: elektron lokalizowany jest przez energię potencjalną $U_{conf}(x, y, z)$ oraz znajduje się w polu magnetycznym skierowanym w kierunku osi y $\vec{B} = (0, B, 0)$. Hamiltonian $h(x, y, z)$ we współrzędnych kartezjańskich, w cechowaniu Landaua będzie miał postać:

$$h(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + i\hbar\omega_c(z-z_0)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{m}{2}\omega_c^2(z-z_0)^2 + U_{conf}(x, y, z), \quad (6.6)$$

gdzie m jest masą elektronu, $\omega_c = eB/m$ częstością cyklotronową a z_0 stałą cechowania. Hamiltonian (6.6) zawiera zarówno części rzeczywiste jak i urojone, dlatego niezbędne jest wykonywanie rachunku na liczbach zespolonych, co oznacza, że funkcje $f(x, y, z)$, $\phi(x, y, z)$ i $\psi_i(x, y, z)$ będą funkcjami zespolonymi zmiennych rzeczywistych.

Obliczenia przeprowadzamy na trójwymiarowej siatce (x_i, y_i, z_i) , dla której odległości międzywęzłowe w kierunkach x, y, z wynoszą odpowiednio Δ_x, Δ_y i Δ_z .

Jeśli użyjemy do aproksymacji pochodnych na siatce ilorazów różnicowych (2.7) funkcja $f(x_i, y_i, z_i)$ (6.2) będzie miała postać:

$$\begin{aligned}
f(x_i, y_i, z_i) = & h(x_i, y_i, z_i)\phi(x, y, z) = \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\phi(x_i - \Delta_x, y_i, z_i) - 2\phi(x_i, y_i, z_i) + \phi(x_i + \Delta_x, y_i, z_i)}{\Delta_x^2} \right. \\
& + \frac{\phi(x_i, y_i - \Delta_y, z_i) - 2\phi(x_i, y_i, z_i) + \phi(x_i, y_i + \Delta_y, z_i)}{\Delta_y^2} \\
& \left. + \frac{\phi(x_i, y_i, z_i - \Delta_z) - 2\phi(x_i, y_i, z_i) + \phi(x_i, y_i, z_i + \Delta_z)}{\Delta_z^2} \right] \\
& + i\hbar\omega_c(z - z_0) \frac{\phi(x_i + \Delta_x, y_i, z_i) - \phi(x_i - \Delta_x, y_i, z_i)}{2\Delta_x} \\
& + \left(\frac{m}{2}\omega_c^2(z - z_0)^2 + U_{conf}(x_i, y_i, z_i) \right) \phi(x_i, y_i, z_i) .
\end{aligned} \tag{6.7}$$

Na wszystkich powierzchniach otaczających obszar obliczeń narzucono warunek brzegowy :

$$\phi(\vec{r}_{brzeg}) = 0 . \tag{6.8}$$

Warunek ten jest równoważny wystawieniu na brzeg obszaru nieskończenie wysokich barier potencjału.

Obliczenia na siatce trójwymiarowej są czasochłonne, dlatego w wypadku gdy układ posiada symetrię korzystamy z niej. W rozdziale drugim omówiono strukturę [83] posiadającą symetrię cylindryczną. Dzięki skorzystaniu z symetrii osiowej zredukowaliśmy liczbę zmiennych potrzebną do opisu układu trójwymiarowego do dwóch ρ i z . Dla elektronu znajdującego się w polu energii potencjalnej $U_{conf}(\vec{r}) = U_{conf}(\rho, z)$ i w polu magnetycznym $\vec{B} = (0, 0, B)$ przyłożonym w kierunku z , hamiltonian h (6.1) we współrzędnych cylindrycznych ma postać:

$$h(\rho, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_\varphi^2}{\rho^2} \right) - U_{conf}(\rho, z) + \frac{1}{8}\omega_c^2\rho^2 - \frac{1}{2}\omega_cm_\varphi , \tag{6.9}$$

gdzie m_φ jest magnetyczną liczbą kwantową.

Wyznaczenie funkcji i energii własnych dla powyższego hamiltonianu przeprowadzono na dwuwymiarowej siatce (ρ_i, z_i) , dla której odległości międzywęzłowe wynoszą odpowiednio Δ_ρ i Δ_z . Zapiszmy funkcję $f(\rho_i, z_i)$ (6.2) w węzłach siatki :

$$\begin{aligned}
f(\rho_i, z_i) = h(\rho_i, z_i)\phi(\rho, z) = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\phi(\rho_i + \Delta_\rho, z_i) - 2\phi(\rho_i, z_i) + \phi(\rho_i - \Delta_\rho, z_i)}{\Delta_\rho^2} \right. \\
& + \frac{1}{\rho_i} \frac{\phi(\rho_i + \Delta_\rho, z_i) - \phi(\rho_i - \Delta_\rho, z_i)}{2\Delta_\rho} + \frac{m_\varphi^2 \phi(\rho_i, z_i)}{\rho_i^2} \\
& \left. + \frac{\phi(\rho_i, z_i - \Delta_z) - 2\phi(\rho_i, z_i) + \phi(\rho_i, z_i + \Delta_z)}{\Delta_z^2} \right] \\
& + \left(\frac{1}{8} \omega_c^2 r_i^2 - \frac{1}{2} \hbar \omega_c m_\varphi + U_{conf}(\rho_i, z_i) \right) \phi(\rho_i, z_i) .
\end{aligned} \tag{6.10}$$

Dla węzłów o współrzędnej $\rho = 0$ nie możemy określić działania hamiltonianu h na funkcję $\psi(\rho, z)$, wartość funkcji $\phi(0, z)$ wyznaczamy korzystając z własności funkcji falowej którą wyznaczamy. Dla stanów s ($m_\varphi=0$) mamy:

$$\frac{\partial \phi(\rho, z)}{\partial \rho} = 0 , \tag{6.11}$$

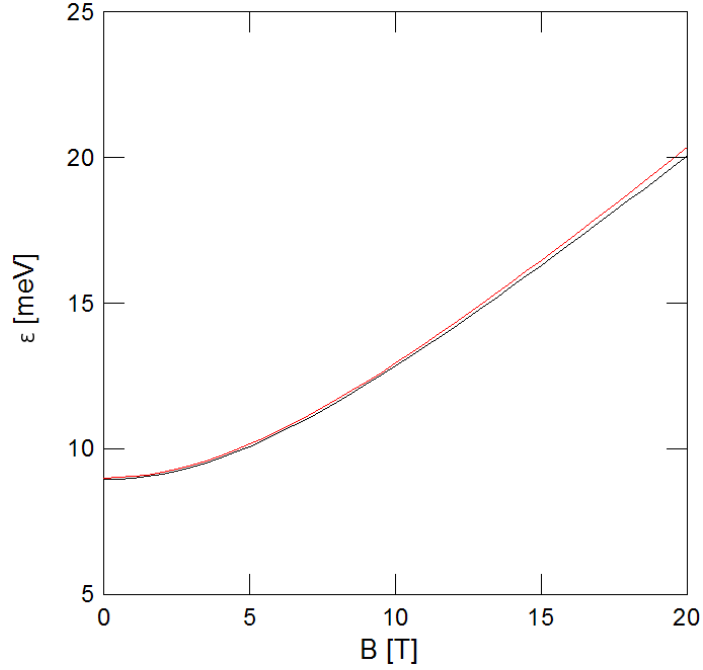
z kolei dla stanów p czy d ($m_\varphi > 0$):

$$\phi(0, z) = 0 . \tag{6.12}$$

Zapiszmy te warunki na wartość funkcji na siatce:

$$\begin{cases} \phi(0, z_i) = \frac{1}{3} (4\phi(\Delta_\rho, z_i) - \phi(2\Delta_\rho, z_i)) & \text{dla } m_\varphi = 0 \\ \phi(0, z_i) = 0 & \text{dla } m_\varphi \neq 0 . \end{cases} \tag{6.13}$$

Jako warunek brzegowy przyjęliśmy warunek (6.8), czyli wyzerowaliśmy funkcję ϕ . Metodę ITS wykorzystywaliśmy również do rachunku problemów o mniejszej złożoności, np. wyznaczenie funkcji własnych i energii elektronu w układzie dwuwymiarowym, który stanowi elektron znajdujący się w studni kwantowej położonej w sąsiedztwie metalowej elektrody (rozdział 4), lub rachunek przeprowadzony na siatce jednowymiarowej do wyznaczenia gęstości 2DEG (warunek asymptotyczny – podrozdział 3.2).



Rys. 6.1: Energia ϵ_0 układu 1-elektronowego w funkcji wartości pola magnetycznego. Linia czerwoną zaznaczono energię wyznaczoną analitycznie, linią czarną zaznaczono energię wyznaczoną metodą czasu urojonego.

Poprawność metody czasu urojonego zbadano przez porównanie energii stanu podstawowego elektronu uzyskanej z metody czasu urojonego z rozwiązaniem analitycznym przedstawionym w pracy [92]. Rachunek metodą czasu urojonego wykonano we współrzędnych kartezjańskich, w obszarze obliczeń, który stanowi prostopadłościan o długości krawędzi $L_x = L_y = 120$ nm i $L_z = 60$ nm. Początek układu współrzędnych punkt $(0, 0, 0)$ umieszczony jest dokładnie w środku prostopadłościanu. Na obszarze prostopadłościanu zdefiniowano siatkę zawierającą po 19 równomiernie rozmieszczonych węzłów w każdym kierunku. Przyjęto trójwymiarową energię potencjalną, którą stanowi suma energii potencjalnych oscylatorów harmonicznyc

$$U_{conf}(x, y, z) = \frac{m}{2}\omega^2 (x^2 + y^2) + \frac{m}{2}\omega_z^2 z^2, \quad (6.14)$$

gdzie $\hbar\omega = 3$ meV , $\hbar\omega_z = 12$ meV.

Elektron znajduje się w polu magnetycznym o indukcji $\vec{B} = (0, 0, B)$, w funkcji której wyznaczamy energię ϵ z (6.1). Wyniki zamieszczono na rys. 6.1. Wyniki, dokładny-analityczny:

$$\epsilon_0 = \frac{\hbar}{2} \left[\omega + \sqrt{\omega_c^2 + (\omega + \omega_z)^2} \right], \quad (6.15)$$

oraz uzyskany metodą czasu urojonego są prawie identyczne.

6.2 Metoda rozwiązywania równania Schrödingera dla układów wieloelektronowych.

Rozważmy układ składający się z N elektronów znajdujących się w zewnętrznym potencjale, który nie posiada żadnej wyraźnej symetrii. Elektrony znajdują się również w zewnętrznym polu magnetycznym $\vec{B} = (0, 0, B)$. Naszym celem jest znalezienie stanu podstawowego N -elektronowej funkcji falowej Ψ oraz jego energii E , spełniających równanie Schrödingera:

$$H\Psi = E\Psi . \quad (6.16)$$

Zapiszmy N elektronowy hamiltonian H :

$$H = \sum_{k=1}^N \left(h_k + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{l=k+1}^N \frac{1}{r_{kl}} \right) , \quad (6.17)$$

gdzie h_k jest hamiltonianem jednoelektronowym dla k -tego elektronu, a $\frac{1}{r_{kl}}$ jest oddziaływaniem kulombowskim pomiędzy k -tym i l -tym elektronem.

Funkcje własne $\psi_i(\vec{r})$ i przynależne im energie własne ϵ_i hamiltonianu h_k wyznaczamy rozwiązując równanie (6.1). Po uwzględnieniu spinowej funkcji falowej $\chi(s_z)$ otrzymamy jednoelektronowe funkcje falowe $f_i(\vec{r}, s_z)$ postaci:

$$f_i(\vec{r}, s) = \psi_i(\vec{r}) \cdot \chi(s_z) , \quad (6.18)$$

gdzie $\chi(s_z)$ jest jedną z dwóch funkcji własnych operatora z-towej składowej spinu.

$$\chi(s_z) = \begin{cases} \alpha(s_z) ; & \text{dla } s_z = +\frac{1}{2} \\ \beta(s_z) ; & \text{dla } s_z = -\frac{1}{2} \end{cases} . \quad (6.19)$$

Funkcje $f_i(\vec{r}, s_z)$ użyjemy do konstrukcji wyznaczników Slatera F_j :

$$F^j = F^j(\vec{r}_1, s_{z1}, \dots, \vec{r}_N, s_{zN}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} f_{j1}(\vec{r}_1, s_{z1}) & f_{j2}(\vec{r}_1, s_{z1}) & \dots & f_{jN}(\vec{r}_1, s_{z1}) \\ f_{j1}(\vec{r}_2, s_{z2}) & f_{j2}(\vec{r}_2, s_{z2}) & \dots & f_{jN}(\vec{r}_2, s_{z2}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_{j1}(\vec{r}_N, s_{zN}) & f_{j2}(\vec{r}_N, s_{zN}) & \dots & f_{jN}(\vec{r}_N, s_{zN}) \end{vmatrix} . \quad (6.20)$$

Do konstrukcji wyznacznika Slatera dla układu N -elektronowego używa się N różnych funkcji falowych $f_j(\vec{r}, s_z)$, gdzie $j = j1, j2, \dots, jN$. Wprowadźmy pojęcie permutacji pierwotnej, dla której indeks funkcji jest taki sam jak indeks argumentu:

$$f_{j1}(\vec{r}_1, s_{z1}) \cdot f_{j2}(\vec{r}_2, s_{z2}) \cdot \dots \cdot f_{jN}(\vec{r}_N, s_{zN}) . \quad (6.21)$$

Pozostałe permutacje konstruuje się poprzez kolejne zamiany indeksów pary funkcji f_{jl} i f_{jk} . Dla przykładu z permutacji pierwotnej po zamianie indeksów $l = 1$ i $k = 2$ otrzymujemy:

$$f_{j1}(\vec{r}_1, s_{z1}) \cdot f_{j2}(\vec{r}_2, s_{z2}) \cdot \dots \cdot f_{jN}(\vec{r}_N, s_{zN}) \rightarrow -f_{j2}(\vec{r}_1, s_{z1}) \cdot f_{j1}(\vec{r}_2, s_{z2}) \cdot \dots \cdot f_{jN}(\vec{r}_N, s_{zN}) . \quad (6.22)$$

Zamieniając indeksy przemnażamy całość przez czynnik -1 w celu zapewnienia antysymetrii elektronowej funkcji falowej. W sumie otrzymamy $N!$ różnych permutacji, które ponumerujemy indeksem ip . Dla uproszczenia zapisu przyjmijmy nową notację, zastępując zmienną (\vec{r}_i, s_{zi}) indeksem (i) i zapiszmy wyznacznik Slatera (6.20) w postaci sumy permutacji:

$$F_j = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k=1}^N f_{jip(k)}(k) . \quad (6.23)$$

Posiadając $2N_b$ różnych funkcji $f_i(\vec{r}, s_z)$ jesteśmy w stanie skonstruować $2N_b$ po N różnych wyznaczników F_j . Zbiór antysymetrycznych funkcji F_j stanowi ortonormalną bazę, w której rozwiniemy funkcję Ψ będącą rozwiązaniem równania (6.16):

$$\Psi = \sum_j c_j F_j . \quad (6.24)$$

Funkcje własne Ψ są jednocześnie funkcjami własnymi operatora kwadratu całkowitego spinu S_{op}^2 o wartościach własnych $S(S+1)$. Dla każdego N stan podstawowy odpowiada innej wartości S , która może zależeć od potencjału zewnętrznego. Przy zaniedbaniu spinowego efektu Zeemana stan podstawowy jest zdegenerowany ze względu na wartość rzutu spinu całkowitego na kierunek z , przy czym $S_z = \{-S, -S+1, \dots, S-1, S\}$. Dzięki temu szukając stanu podstawowego dla każdego N możemy założyć *minimalną* co do wartości bezwzględnej z-ową składową spinu to jest $S_z = 0$ dla parzystego N i $S_z = 1/2$ dla nieparzystego N . Założenie S_z polega na wyborze ze zbioru wszystkich możliwych wyznaczników Slatera (6.20) tych, które są funkcjami własnymi z-owej składowej spinu o wybranej wartości. Wartość S^2 stanu podstawowego można określić sprawdzając jego degenerację ze względu na S_z . I tak sprawdziliśmy że w rozważanych przez nas układach dla dwóch elektronów $S = 0$, dla trzech $S = 1/2$.

Współczynniki rozwinięcia c_j z (6.24) wyznaczymy przez diagonalizację macierzy H_{op} , której elementy wynoszą:

$$H_{op} = \langle F_o | H | F_p \rangle . \quad (6.25)$$

Diagonalizację macierzy przeprowadzono standardową procedurą biblioteczną [91]. Wstawmy do powyższego równania operator H z (6.17)

$$H_{op} = \left\langle F_o \left| \sum_{k=1}^N \left(h_k + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \sum_{l=k+1}^N \frac{1}{r_{kl}} \right) \right| F_p \right\rangle . \quad (6.26)$$

Po dokonaniu rachunku dla członu zawierającego hamiltonian jednoelektronowy h_k otrzymamy:

$$H_{op} = \sum_{k=1}^N e_{pk} \delta_{op} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \left\langle F_o \left| \sum_{k=1}^N \sum_{l=k+1}^N \frac{1}{r_{kl}} \right| F_p \right\rangle . \quad (6.27)$$

Przyjrzyjmy się bliżej wyrazowi $\langle F_o | \sum_{k=1}^N \sum_{l=k+1}^N \frac{1}{r_{kl}} | F_p \rangle$:

$$\left\langle \frac{1}{N!} \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{l=1}^N f_{oip(l)}(l) \left| \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \dots + \frac{1}{r_{23}} + \dots + \frac{1}{r_{(N-1)N}} \right| \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k=1}^N f_{pip(k)}(k) \right\rangle . \quad (6.28)$$

Operator oddziaływania kulombowskiego pomiędzy l -tym i k -tym elektronem jest symetryczny ze względu na zamianę indeksów. Dzięki temu wystarczy policzyć oddziaływanie tylko dla jednej spośród $N!$ permutacji występujących z lewej strony równania:

$$\left\langle \prod_{l=1}^N f_{ol}(l) \left| \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \dots + \frac{1}{r_{23}} + \dots + \frac{1}{r_{(N-1)N}} \right| \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k=1}^N f_{pip(k)}(k) \right\rangle. \quad (6.29)$$

Powyższą całkę liczymy w ten sam sposób dla każdej pary elektronów, dlatego do dalszych rozważań wybierzemy z sumy przykładowy składnik, odpowiadający za oddziaływanie pomiędzy 1-szym a 2-gim elektronem:

$$\left\langle \prod_{l=1}^N f_{ol}(l) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k=1}^N f_{pip(k)}(k) \right\rangle. \quad (6.30)$$

Wyciągnijmy znak sumy po permutacjach przed bracket, oraz rozdzielmy funkcję $f_{ji}(i)$ na składową spinową $\chi(s_{zi})$ oraz położeniową $\psi_{ji}(\vec{r}_i)$, a następnie wykonajmy całkowania po tych samych zmiennych:

$$\begin{aligned} & \left\langle \prod_{l=1}^N f_{ol}(l) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k=1}^N f_{pip(k)}(k) \right\rangle = \\ & = \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k,l=1}^N \langle \chi(s_{zl}) | \chi(s_{zk}) \rangle \cdot \prod_{k,l=3}^N \langle \psi_{ol}(\vec{r}_l) | \psi_{pip(k)}(\vec{r}_k) \rangle \cdot \\ & \cdot \left\langle \psi_{o1}(\vec{r}_1) \psi_{o2}(\vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{pip(1)}(\vec{r}_1) \psi_{pip(2)}(\vec{r}_2) \right\rangle = \\ & = \sum_{ip=1}^{N!} (-1)^{ip} \prod_{k,l=1}^N \delta(s_{zl}, s_{zk}) \cdot \prod_{k,l=3}^N \{ \delta(l, k) \cdot \delta(ol, pip(k)) \} \cdot \\ & \cdot \left\langle \psi_{o1}(\vec{r}_1) \psi_{o2}(\vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{pip(1)}(\vec{r}_1) \psi_{pip(2)}(\vec{r}_2) \right\rangle. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Nietrywialnym członem w powyższym wyrażeniu jest jedynie całka odpychania kulombowskiego:

$$\begin{aligned} I & = \left\langle \psi_{o1}(\vec{r}_1) \psi_{o2}(\vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{pip(1)}(\vec{r}_1) \psi_{pip(2)}(\vec{r}_2) \right\rangle = \\ & = \int d^6 r \psi_{o1}(\vec{r}_1) \psi_{o2}(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_{pip(1)}(\vec{r}_1) \psi_{pip(2)}(\vec{r}_2) = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}}, \end{aligned} \quad (6.32)$$

gdzie $u(\vec{r}_1) = \psi_{o1}(\vec{r}_1) \psi_{pip(1)}(\vec{r}_1)$, $w(\vec{r}_2) = \psi_{o2}(\vec{r}_2) \psi_{pip(2)}(\vec{r}_2)$

Podwójną całkę (6.32) obliczamy numerycznie we współrzędnych kartezjańskich na siatce pokrywającej obszar całkowania o objętości V . Odległości węzłów siatki są stałe i wynoszą w kierunkach x, y i z odpowiednio Δ_x, Δ_y i Δ_z .

Podzielmy obszar całkowania w taki sposób, aby każdy węzeł siatki $i = (x_i, y_i, z_i)$ stanowił środek prostopadłościanu V_i o objętości $\Delta_x \times \Delta_y \times \Delta_z$. Podwójną całkę (6.32) po całym obszarze zamieniamy na sumę całek po prostopadłościanach V_i :

$$\begin{aligned} I &= \int_V d^3 r_1 \int_V d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} = \\ &= \sum_{i,j} \int_{V_i} d^3 r_1 \int_{V_j} d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} . \end{aligned} \quad (6.33)$$

Wyznaczenie powyższej całki jest najbardziej czasochłonnym elementem naszych rachunków, gdyż musimy ją policzyć dla każdej kombinacji czterech funkcji ψ należących do bazy użytej do obliczeń.

Metoda całkowania po niepokrywających się prostopadłościanach ($i \neq j$) różni się od metody całkowania po tych samych prostopadłościanach, dlatego wydzielimy z sumy całek (6.33) składniki zawierające całki przebiegające po tych samych prostopadłościanach:

$$I = \sum_{i,j;i \neq j} \int_{V_i} d^3 r_1 \int_{V_j} d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} + \sum_i \int_{V_i} d^3 r_1 \int_{V_i} d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} . \quad (6.34)$$

Wyznaczając całki po obszarach nie przekrywających się ($i \neq j$) stosujemy dwa przybliżenia, pierwsze przyjmując stałą wartość funkcji $u(\vec{r}_1) = u(x_i, y_i, z_i)$ i $w(\vec{r}_2) = w(x_j, y_j, z_j)$ w całej objętości prostopadłościanu. Drugie przybliżenie polega na przybliżonym sposobie wyznaczania wyrazu $\frac{1}{r_{12}}$, redukujemy go do odległości pomiędzy środkami prostopadłościanów i -tego i j -tego $\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$.

W wyniku otrzymujemy końcowy przepis na całkę po różnych prostopadłościanach:

$$\begin{aligned} &\int_{V_i} d^3 r_1 \int_{V_j} d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \approx \\ &\approx (\Delta_x \times \Delta_y \times \Delta_z)^2 u(x_i, y_i, z_i) w(x_j, y_j, z_j) \frac{1}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}} . \end{aligned} \quad (6.35)$$

Całkę dla $V_i = V_j$ wyznaczamy również w sposób przybliżony, przyjmując stałą wartość funkcji w całym obszarze prostopadłościanu:

$$\int_{V_i} d^3 r_1 \int_{V_i} d^3 r_2 u(\vec{r}_1) w(\vec{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \approx u(x_i, y_i, z_i) w(x_i, y_i, z_i) \int_{V_0} d^3 r_1 \int_{V_0} d^3 r_2 \frac{1}{r_{12}} . \quad (6.36)$$

Całka występująca po prawej stronie równania (6.36) nie zależy od położenia prostopadłościanu i dzięki czemu wystarczy policzyć ją tylko raz np. dla $i = 0$, a następnie użyć jej jako wagi dla iloczynu funkcji $u(x_i, y_i, z_i) \cdot w(x_i, y_i, z_i)$ dla każdego węzła siatki i . Zapiszmy całkę (6.36) we współrzędnych kartezjańskich $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ oraz $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$:

$$\int_{-\Delta_x/2}^{\Delta_x/2} dx_1 \int_{-\Delta_y/2}^{\Delta_y/2} dy_1 \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz_1 \int_{-\Delta_x/2}^{\Delta_x/2} dx_2 \int_{-\Delta_y/2}^{\Delta_y/2} dy_2 \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz_2 \frac{1}{r_d}, \quad (6.37)$$

gdzie $r_d = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2}$.

Dokonajmy zamiany zmiennych i wprowadźmy w miejsce (x_2, y_2, z_2) zmienne (x_d, y_d, z_d) :

$$\begin{aligned} x_d &= x_1 - x_2 \\ y_d &= y_1 - y_2 \\ z_d &= z_1 - z_2. \end{aligned} \quad (6.38)$$

W wyniku zamiany zmiennych $dx_d = -dx_2$, $dy_d = -dy_2$ i $dz_d = -dz_2$, zmianie ulegną również granice całkowania, oraz postać funkcji podcałkowej:

$$- \int_{-\Delta_x/2}^{\Delta_x/2} dx_1 \int_{-\Delta_y/2}^{\Delta_y/2} dy_1 \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz_1 \int_{z_1+\Delta_z/2}^{z_1-\Delta_z/2} dz_d \int_{x_1+\Delta_x/2}^{x_1-\Delta_x/2} dx_d \int_{y_1+\Delta_y/2}^{y_1-\Delta_y/2} dy_d \frac{1}{\sqrt{x_d^2 + y_d^2 + z_d^2}}. \quad (6.39)$$

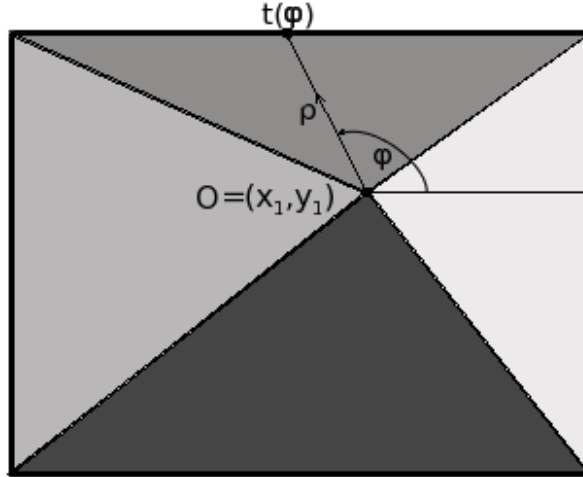
Całkę po x_d , y_d i z_d wyliczymy we współrzędnych cylindrycznych (ρ, ϕ, z_d) :

$$\rho = \sqrt{x_d^2 + y_d^2} \quad (6.40)$$

$$\phi = \arctan(x_d/y_d),$$

dzięki którym zastosowaniu pozbywamy się osobliwości w mianowniku dla $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$. Zapiszmy całkę (6.39) w nowych współrzędnych:

$$- \int_{-\Delta_x/2}^{\Delta_x/2} dx_1 \int_{-\Delta_y/2}^{\Delta_y/2} dy_1 \int_{-\Delta_z/2}^{\Delta_z/2} dz_1 \int_{z_1+\Delta_z/2}^{z_1-\Delta_z/2} dz_d \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{t(\phi)} d\rho \frac{\rho}{\sqrt{\rho^2 + z_d^2}}. \quad (6.41)$$

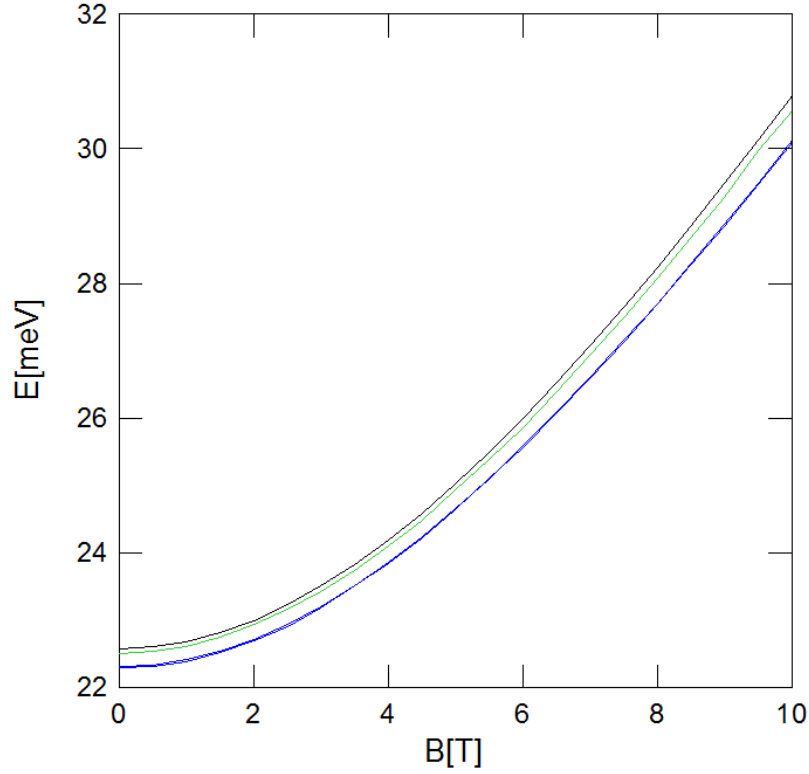


Rys. 6.2: Obszar wyznaczania całki (6.39) po (ρ, ϕ) i jego podział na trójkąty.

Całkę po zmiennych (ρ, ϕ) , liczymy następująco: prostokątny obszar całkowania dzielimy na cztery trójkąty, jak na rys. 6.2. Całkę po ϕ w obszarze $(0, 2\pi)$ podzielimy na cztery całki po kątach leżących przy wierzchołku O i należących do poszczególnych trójkątów. Granice tych czterech całek wyznaczamy z zależności trygonometrycznych. Całkę po ρ liczymy analitycznie w przedziale od 0 do $t(\phi)$. $t(\phi)$ jest odległością punktu O od boku prostokąta. Pozostałe całki (po $x_1, y_1, z_1, z_d, \varphi$) liczymy numerycznie.

Poprawność metody mieszania konfiguracji badano przez porównanie energii dzięki niej uzyskanej z energią wyznaczoną przy pomocy dokładnej metody wariacyjnej przedstawionej w pracy [92]. Układ testowy stanowią dwa elektrony zlokalizowane przez potencjał postaci (6.14). Przyjęto $\hbar\omega_x = \hbar\omega_y = 3meV$, $\hbar\omega_z = 12meV$. Elektrony znajdują się w polu magnetycznym o indukcji $\vec{B} = (B, 0, 0)$, w funkcji której wyznaczamy energię E układu.

Wyniki porównania przedstawiono na rysunku 6.3, gdzie linią czarną zaznaczyliśmy energię dokładną, dwie linie niebieskie przedstawiają energię wyznaczoną z rachunku na siatce zawierającej $13 \times 13 \times 13$ węzłów, z bazą zawierającą $N_b = 6$ i $N_b = 10$ najniższych poziomów jednoelektronowych. Linia zielona, znacznie bliższa wynikowi dokładnemu została wyznaczona w rachunku na siatce zawierającej $19 \times 19 \times 19$ węzłów, z bazą zawierającą $N_b = 6$ najniższych poziomów jednoelektronowych. W obydwu przypadkach siatkę rozmieszczono równomiernie na całym obszarze obliczeń, który stanowi prostopadłościan o rozmiarach $L_x = L_y = 120$ nm, $L_z = 60$ nm. Dla gęstszej siatki największa różnica pomiędzy liniami zieloną i czarną wynosi 0.23 meV dla $B = 10$ T. Taka wielkość błędu jest w zupełności akceptowalna.



Rys. 6.3: Energia E układu 2-elektronowego w funkcji wartości indukcji pola magnetycznego B . Wynik dokładny zaznaczono linią czarną, wynik obliczeń na siatce o 6859 węzłach linią zieloną, na siatce o 2197 węzłach linią niebieską,

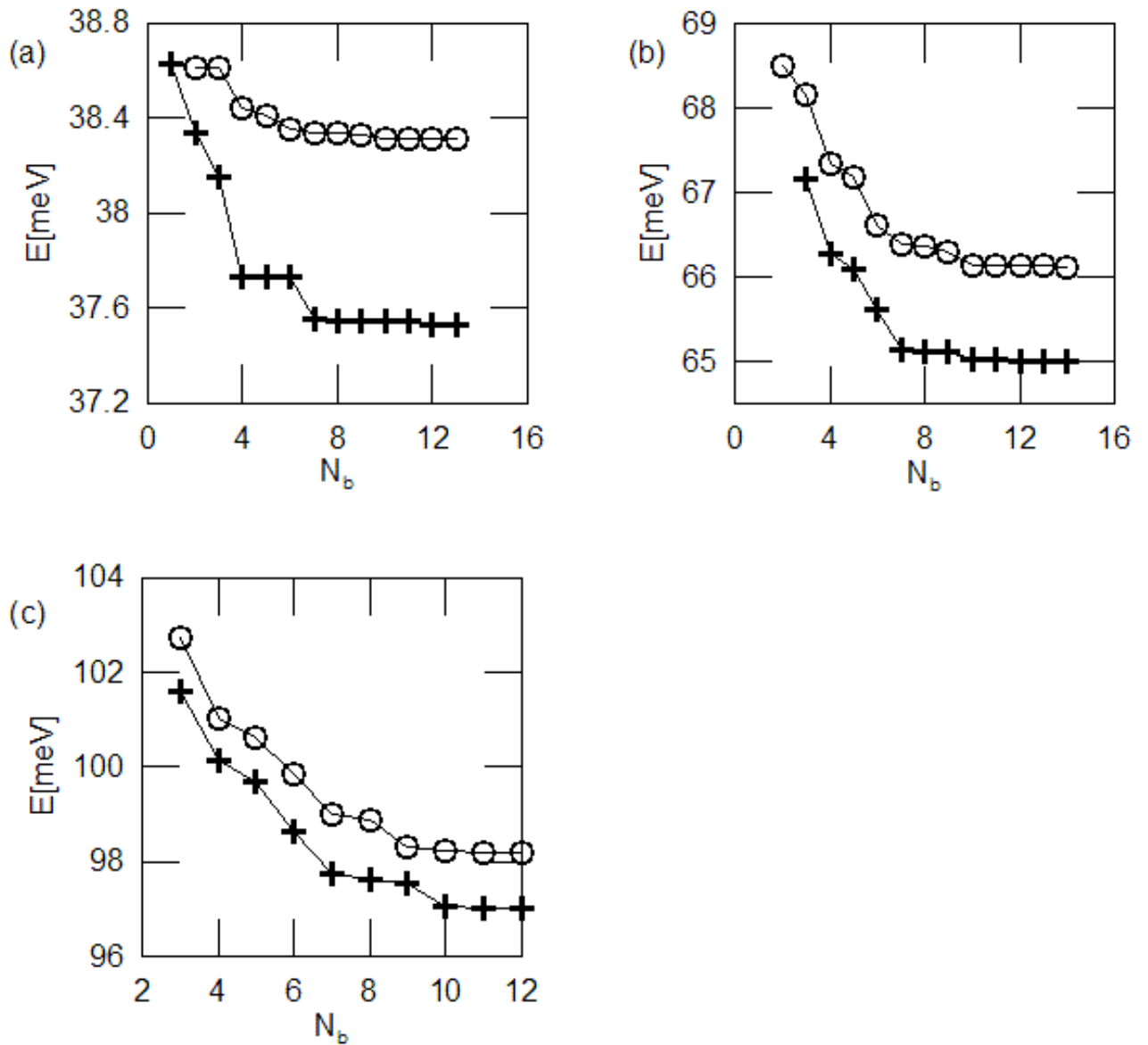
Wykonano również test zbieżności procedury w zależności od rozmiaru bazy N_b dla układów zawierających $N = 2, 3$ i 4 elektrony. Obliczenia wykonano na siatce zawierającej $19 \times 19 \times 15$ węzłów, rozmieszczonych w prostopadłościanie o długościach krawędzi $L_x = L_y = 102$ nm i $L_z = 40$ nm.

Do rachunku testowego przyjęto energię potencjalną postaci:

$$U_{conf}(x, y, z) = \frac{m}{2}\omega_x^2 x^2 + \frac{m}{2}\omega_y^2 y^2 - a_z(z + \frac{1}{2}L_z)^2, \quad (6.42)$$

gdzie $\hbar\omega_x = 2.18$ meV, $\hbar\omega_y = 3.15$ meV i $a_z = 2 \cdot 10^{-8}$ meV/nm². W kierunku z przyjęto energię potencjalną w postaci odwróconej paraboli, która w tym kierunku dobrze przybliża przebieg energii potencjalnej w rozważanej w rozdziale trzecim kropce kwantowej. Rachunek przeprowadzono dla wartości indukcji pola magnetycznego $B = 10$ T.

Na rysunkach 6.4(a-c) zamieszczono zależność energii układu zawierającego odpowiednio 2, 3 i 4 elektrony w funkcji liczby stanów jednoelektronowych N_b użytych do konstrukcji bazy wyznacznikowej.



Rys. 6.4: Energia E układu (a) 2-elektronowego, (b) 3-elektronowego i (c) 4-elektronowego w funkcji ilości elementów bazy N_b . Krzyżami zaznaczono energię stanu podstawowego, okręgami pierwszego wzbudzonego.

Jako kryterium zbieżności przyjęto warunek, żeby różnica pomiędzy energiami dla bazy zawierającej N_b i $N_b + 1$ funkcji $\psi_i(\vec{r})$ była mniejsza od 0.3 meV. Kryterium jest spełnione jeśli dla dwóch elektronów ($N = 2$) użyjemy $N_b = 8$ funkcji $\psi_i(\vec{r})$, a dla $N = 3, 4$ $N_b = 10$.

Literatura autorska

[A1] K. Lis , S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski *Physica E* **17C** 494 (2003).

[A2] S. Bednarek ,B. Szafran, K. Lis, J. Adamowski *Phys. Rev. B* **68** 155333(2003).

[A3] K. Lis, S. Bednarek and J. Adamowski *TASK Quarterly* **8** No 4, p. 603(2004).

[A4] S. Bednarek, B. Szafran, K. Lis *Phys. Rev. B* **72**,075319(2005).

Bibliografia

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [2] S. Reimann and M. Manninen, *Review of Modern Physics* **74**, 3 (2003).
- [3] W. A. Goddard, D. W. Brenner, S. E. Lyshevski, and G. J. Iafrate, *Handbook of nanoscience, engineering and technology* (CRC Press, 2003).
- [4] C. P. Heij, P. Hadley, and J. E. Mooij, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 1140 (2001).
- [5] G. Zarand, G. T. Zimanyi, and F. K. Wilhelm, *Physical Review B* **62**, 8137 (2000).
- [6] S. Tarucha *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3613 (1996).
- [7] M. Koltonyuk, D. Berman, N. B. Zhitenev, and R. C. Ashoori, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 555 (1999).
- [8] K. L. Wang, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* **2**, 235 (2002).
- [9] H. D. Cheong, T. Fujisawa, T. Hayashi, Y. Hirayama, and Y. H. Jeong, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 3257 (2002).
- [10] Hirayama, H. D. Cheong, and Y. H. Jeong, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 2343 (2004).
- [11] A. Nielsen M. and L. Chuang I, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2000).
- [12] D. S. Abrams and C. P. Williams, Technical report, NASA Jet Propulsion Laboratory **26**, 1484 (1999), Dostępne w internecie <http://arXiv.org/abs/quant-ph/>.
- [13] L. Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, in *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing*, p. 212, ACM, 1996.

- [14] P. Shor, *SIAM Journal of Computing* **26**, 1484 (1997).
- [15] D. Loss and D. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [16] C. H. Bennett, G. Brassard, and N. D. Mermin, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 557 (1992).
- [17] D. P. DiVincenzo, *Science* **270**, 255 (1995).
- [18] N. Linden, S. Popescu, and A. Sudbery, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 243 (1999).
- [19] Y. Masumoto and T. Takagahara, *Semiconductor quantum dots. Physics, spectroscopy and applications* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2002).
- [20] T. Fujisawa, T. Hayashi, and Y. Hirayama, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 13 (2004).
- [21] T. Hayashi, T. Fujisawa, H. D. Cheong, Y. H. Jeong, and Y. Hirayama, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 226804 (2003).
- [22] T. Fujisawa, D. G. Austing, Y. Tokura, Y. Hirayama, and S. Tarucha, *Physics of Semiconductors* **171**, 245 (2003).
- [23] R. Schuster *et al.*, *Nature* **384**, 417 (1997).
- [24] S. Reimann, M. Koskinen, M. Manninen, and B. Mottelson, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3270 (1999).
- [25] M. Manninen, S. Viefers, M. Koskinen, and S. Reimann, *Phys. Rev. B* **64**, 245322 (2001).
- [26] A. Kumar, S. E. Laux, and F. Stern, *Phys. Rev. B* **42**, 5166 (1990).
- [27] B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, and J. Adamowski, *Phys. Rev. B* **69**, 125344 (2004).
- [28] S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski, and B. Szafran, *Phys. Rev. B* **67**, 205316 (2003).
- [29] C. R. Kagan, D. B. Mitzi, and C. Dimitrakopoulos, *Science* **286**, 945 (1999).
- [30] C. P. Heij, D. C. Dixon, C. H. van der Wal, P. Hadley, and J. E. Mooij, *Phys. Rev. B* **67**, 144512 (2003).
- [31] S. J. Tans *et al.*, *Nature* **386**, 474 (1997).

- [32] P. M. Petroff, A. Lorke, and A. Imamoglu, *Phys. Today* **54**, 46 (2001).
- [33] W. van der Wiel, T. Fujisawa, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, *Jap. J. Appl. Phys* **40**, 2100 (2001).
- [34] M. Grundmann, *Physica* **5**, 167 (2000).
- [35] V. I. Klimov *et al.*, *Science* **13**, 290 (2000).
- [36] K. Shinohara *et al.*, *Science* **229**, 299 (2003).
- [37] R. Ashoori *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3088 (1992).
- [38] N. B. Zhitenev, R. C. Ashoori, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2308 (1997).
- [39] N. B. Zhitenev, M. Brodsky, R. C. Ashoori, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Science* **285**, 715 (1999).
- [40] M. Brodsky, N. Zhitenev, and R. C. Ashoori, *Phys. Rev. Lett* **81**, 2356 (2000).
- [41] S. Tarucha *et al.*, *Physica E* **10**, 45 (2001).
- [42] M. Upward, J. Janssen, L. Gurevich, A. Morpurgo, and L. Kouwenhoven, *Appl. Phys. A* **72**, 253 (2001).
- [43] W. van der Wiel *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1 (2003).
- [44] J. M. Elzerman *et al.*, *Physical Review B* **67**, 161308 (2003).
- [45] R. Deblock, E. Oac, L. Gurevich, and L. Kouwenhoven, *Science* **301**, 203 (2003).
- [46] R. Hanson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 196802 (2003).
- [47] J. M. Elzerman, R. Hanson, L. H. W. van Beveren, L. M. K. Vandersypen, and L. P. Kouwenhoven, *Applied Physics Letter* **82**, 4618 (2004).
- [48] J. M. Elzerman *et al.*, *Nature* **430**, 431 (2004).
- [49] J. Elzerman *et al.*, *Physica E* **25**, 135 (2004).
- [50] L. Vandersypen *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4394 (2004).
- [51] R. Hanson *et al.*, *Phys. Rev. B* **70**, 241304 (2004).

- [52] R. Hanson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 196802 (2005).
- [53] F. H. Koppens *et al.*, Science **309**, 1346 (2005).
- [54] D. K. Ferry, R. Akis, and J. P. Bird, Phys. Rev. Lett. **93**, 026803 (2004).
- [55] I. H. Chan, P. Fallahi, R. M. Westerwelt, M. Hanson, and A. C. Gossard, Nanotechnology **15**, 609 (2004).
- [56] H. L. Stormer, Reviews of Modern Physics **71**, 4 (1999).
- [57] T. Chakraborty and P. Pietilainen, *The Quantum Hall Effects* (Springer Series in Solid State Sciences, 1995).
- [58] S. Adachi, Japan Appl. Phys. **58**, 3 (1985).
- [59] M. A. Herman and H. Sitter, *Molecular Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status* (Springer, 1998).
- [60] E. F. Schubert, *Doping in III-V Semiconductors* (Cambridge University Press, 1993).
- [61] S. J. Bass, J. Crystal Growth **47**, 613 (1979).
- [62] K. Shinohara *et al.*, Semicond. Sci. Technol **11**, 125 (1996).
- [63] M. L. Cohen and C. J. R., *Electronic structure and optical properties of semiconductors* (Springer, 1988).
- [64] F. Lambert, M. Goffman, J. Bourgoin, and P. Hesto, Nanotechnology **14**, 772 (2003).
- [65] G. Lientschnig, *Simulating Hybrid Circuits of Single-Electron Transistors and Field-Effect Transistors*, PhD thesis, TU Delft, 2003, Do wglądu na stronie www: <http://qt.tn.tudelft.nl/publi/papers.php>.
- [66] M. Brodsky, *Charging of Small Two-Dimensional Electron Puddles*, PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2000, Do wglądu na stronie www: <http://electron.mit.edu/theses/>.
- [67] A. Kumar, S. Laux, and F. Stern, Phys. Rev. B **42**, 5166 (1990).
- [68] B. Szafran, S. Bednarek, and J. Adamowski, Phys. Rev. B **67**, 04531 (2003).

- [69] J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **62**, 4234 (2000).
- [70] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, Phys. Rev. B **52**, 11969 (1995).
- [71] G. Albinus, H.-C. Kaiser, and J. Rehberg, *On stationary Schroedinger-Poisson equations* (Institute for Applied Analysis and Stochastics, 1993).
- [72] P. Maksym and T. Chakraborty, Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990).
- [73] B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **61**, 1971 (2000).
- [74] S. Bednarek, B. Szafran, and J. Adamowski, Phys. Rev. B **61**, 4461 (2000).
- [75] P. Matagne, J. P. Leburton, D. G. Austing, and S. Tarucha, Phys. Rev. B **65**, 085325 (2002).
- [76] P. Matagne and J. Leburton, Phys. Rev. B **65**, 155311 (2002).
- [77] R. Ravishankar, P. Matagne, J. Leburton, R. Martin, and S. Tarucha, Phys. Rev. B **65**, 035326 (2004).
- [78] L.-X. Zhang, J. P. Leburton, R. Hanson, and L. P. Kouwenhoven, Appl. Phys. Lett. **85**, 2628 (2004).
- [79] D. V. Melnikov *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 085331 (2005).
- [80] M. J. Gilbert and D. K. Ferry, Journal of Applied Physics **95**, 7954 (2004).
- [81] A. Weichselbaum and S. E. Ulloa, Phys. Rev. E **68**, 056707 (2003).
- [82] T. A. S. Pereira, E. W. S. Caetano, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, Brazilian Journal of Physics **34**, 684 (2004).
- [83] R. C. Ashoori *et al.*, Phys. Rev. Lett. **68**, 3088 (1993).
- [84] S. Bednarek, B. Szafran, and K. Lis, Phys. Rev. B **72**, 075319 (2005).
- [85] W. Salejda, *Algebraiczne metody rozwiązywania równania Schroedingera* (Wydawnictwo Naukowe PW, 2002).
- [86] W. R. Frensley, Reviews of Modern Physics **62**, 745 (1990).
- [87] M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, and S. Bednarek, Physica E **15**, 261 (2002).

- [88] M. Field *et al.*, Phys. Rev. Lett. **70**, 1311 (1993).
- [89] J. M. Elzerman *et al.*, Physical Review B **67**, 161308 (2003).
- [90] K. Davies, H. Flocard, S. Krieger, and M. Weiss, Nucl. Phys. A **111**, 123 (1980).
- [91] Źródła biblioteki oraz pełna dokumentacja znajdują się na stronie www:
<http://www.netlib.org/lapack/>.
- [92] M. B. Tavernier *et al.*, Phys. Rev. B **68**, 205305 (2003).