

# Эффекты самосогласованного электростатического потенциала в квантовых ямах с несколькими уровнями размерного квантования в сильных магнитных полях

© А.А. Грешнов<sup>¶</sup>, Г.Г. Зегря

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 6 февраля 2008 г. Принята к печати 11 февраля 2008 г.)

Теоретически изучено влияние самосогласованного электростатического потенциала на спектр двумерных электронных состояний в сильном магнитном поле при условии заполнения более чем одной подзоны размерного квантования. Рассмотрены случаи как поперечной, так и наклонной ориентаций магнитного поля относительно плоскости квантовой ямы. Показано, что в случае строго поперечной ориентации имеются диапазоны концентраций (магнитных полей), в которых реализуется вырождение двух или более уровней Ландау, относящихся к разным подзонам размерного квантования. Наклон магнитного поля относительно оси квантовой ямы приводит к возникновению энергетической щели между этими уровнями, однако величина щели в зависимости от концентрации (магнитного поля) остается практически постоянной в том же диапазоне параметров.

PACS: 73.21.Fg, 73.63.Hs, 75.75.+a

## 1. Введение

Традиционно считается, что при анализе кулоновских эффектов в двумерных полупроводниковых системах (квантовых ямах) в сильном магнитном поле можно не учитывать неоднородное распределение электронной плотности вдоль оси квантовой ямы и соответствующий электростатический потенциал, накладывающийся на потенциал квантовой ямы. Выход за рамки такого приближения действительно не приводит к каким-либо качественно новым эффектам, но лишь в том случае, если заполненной остается лишь нижняя подзона размерного квантования. Как было впервые обнаружено в численных расчетах, проведенных в работах [1,2], согласованное решение уравнений Шредингера и Пуассона приводит к необычному спектру одночастичных состояний, при котором уровни Ландау, относящиеся к разным уровням размерного квантования, могут иметь одинаковую энергию в некотором диапазоне концентраций носителей (магнитных полей). Такое вырождение энергетических уровней и их аномальный наклон приводят к нарушению периодичности осцилляций Шубникова–де-Гааза [3] и де-Гааза–ван Альфена [4]. В настоящей работе впервые развита аналитическая теория рассматриваемых эффектов и выполнено обобщение на случай магнитного поля, наклоненного относительно оси квантовой ямы.

## 2. Теория

Рассмотрим двумерный электронный газ в квантовой яме с несколькими уровнями размерного квантования в сильном магнитном поле  $\mathbf{B}$ , направленном перпендикулярно оси роста  $z$ . Спектр электронных состояний  $e_{mn}$  и волновые функции носителей  $\psi_{mnk}$  в отсутствие

взаимодействия между ними определяются решениями одномерного уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi_m}{dz^2} + U(z)\psi_m = e_m\psi_m, \quad (1)$$

$$\psi_{mnk}(x, y, z) = F_{nk}(x, y)\psi_m(z), \quad (2)$$

$$e_{mn} = e_m + \hbar\omega_c(n + 1/2). \quad (3)$$

Здесь  $U(z)$  — потенциал квантовой ямы,  $\omega_c = eB/m^*c$  — циклотронная частота,  $F_{nk}(x, y)$  — часть волновой функции, описывающая движение носителей в плоскости квантовой ямы [5]. Для простоты мы считаем уровни Ландау вырожденными по спину (т.е. рассматриваем нулевой  $g$ -фактор), учитывая это при подсчете числа состояний, приходящихся на один уровень Ландау. Для описания эффектов кулоновского взаимодействия мы воспользуемся самосогласованным приближением Томаса–Ферми, введя одномерный электростатический потенциал  $\Phi(z)$ :<sup>1</sup>

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi_m}{dz^2} + [U(z) + \Phi(z)]\Psi_m = E_m\Psi_m, \quad (4)$$

$$\frac{d^2\Phi(z)}{dz^2} = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} [N(z) - n_s \sum_{mn} f_{mn} |\Psi_m(z)|^2], \quad (5)$$

$$\Psi_{mnk}(x, y, z) = F_{nk}(x, y)\Psi_m(z), \quad (6)$$

$$E_{mn} = E_m + \hbar\omega_c(n + 1/2). \quad (7)$$

Здесь  $\epsilon$  — диэлектрическая проницаемость,  $N(z)$  — концентрация ионизованных примесей, так что

<sup>1</sup> При этом мы считаем электронную плотность равномерно распределенной в плоскости квантовой ямы, что оправдано для систем с не слишком низкой концентрацией носителей. Выход за рамки этого приближения приводит к эффектам, связанным с корреляциями в распределении носителей в плоскости квантовой ямы, таким как дробный квантовый эффект Холла и вигнеровская кристаллизация.

<sup>¶</sup> E-mail: a\_greshnov@hotmail.com

$$\int N(z)dz = n_s,$$

$$f_{mn} = \frac{1}{\nu} \int D_{mn}(E) f_{FD}(E, T, \mu) dE \quad (8)$$

— относительные числа заполнения соответствующих уровней Ландау,  $\sum f_{mn} = 1$ ,  $D_{mn}(E)$  — плотность состояний,  $\int D_{mn}(E) dE = 1$ ,  $\nu = n_s/n_L$  — фактор заполнения вырожденных по спину уровней Ландау,  $n_L = \pi^{-1} a_H^{-2}$ ,  $a_H = \sqrt{\hbar c / (eB)}$  — магнитная длина. Приближенное решение системы уравнений (4)–(7) можно найти, учтя поправки к невозмущенным энергиям  $e_m$  в 1-м порядке теории возмущений:

$$E_m = e_m + \mathcal{E}_C J_m - \mathcal{E}_C \sum_{m'n'} f_{m'n'} I_{mm'}, \quad (9)$$

$$J_m = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^2(z) dz \int_{-\infty}^z dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' N(z''), \quad (10)$$

$$I_{mm'} = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^2(z) dz \int_{-\infty}^z dz' \int_{-\infty}^{z'} dz'' \psi_{m'}^2(z''). \quad (11)$$

Здесь мы ввели характерную кулоновскую энергию  $\mathcal{E}_C = 4\pi e^2 n_s L / \epsilon$ , где  $L$  — ширина квантовой ямы. Ограничимся далее случаем нулевой температуры  $T = 0$ , при этом система находится в основном состоянии, которое может быть найдено минимизацией полной энергии

$$E = \sum_{mn} f_{mn} (e_{mn} + \mathcal{E}_C J_m) - \frac{\mathcal{E}_C}{2} \sum_{m,n,m',n'} f_{mn} f_{m'n'} I_{mm'}$$

при дополнительных условиях  $\sum f_{mn} = 1$ ,  $0 \leq f_{mn} \leq 1/\nu$ . В качестве примера рассмотрим наиболее простой и наглядный случай заполнения трех уровней Ландау, два из которых принадлежат основному уровню размерного квантования,  $m = 1$ , а третий — первому возбужденному уровню размерного квантования,  $m = 2$ . При этом пренебрежем уширением уровней, что оправдано при условии, что их ширина много меньше циклотронной энергии и энергии размерного квантования. Поскольку при нулевой температуре отличными от нуля или единицы могут быть лишь числа заполнения состояний, энергии которых совпадают с уровнем химического потенциала  $\mu$ ,  $f_{10} = 1/\nu$ . Кроме того, фиксирована сумма  $f_{10} + f_{11} + f_{20} = 1$ , следовательно, независимым является лишь один параметр, в качестве которого удобно выбрать  $f_{20}$ . Минимизируя полную энергию (12) относительно  $f_{20}$ , получаем

$$\hbar\omega_c = e_2 - e_1 + \mathcal{E}_C (J_2 - J_1 + I_{11} - I_{21}) + \mathcal{E}_C f_{20} I, \quad (13)$$

где  $I = I_{12} + I_{21} - I_{11} - I_{22}$ . Заметим, что уравнение (13) в точности совпадает с условием равенства энергетических уровней  $E_{11}$  и  $E_{20}$ . Ширину области магнитных полей, в которой реализуется вырождение  $E_{11}$  и  $E_{20}$ , найдем из ограничения на  $f_{20}$ ,  $0 \leq f_{20} \leq \min(1/\nu, 1 - 1/\nu)$ :

$$\frac{\Delta B}{B} = 2I \frac{e^2}{\epsilon L} \frac{2m^* L^2}{\hbar^2} \min(1, \nu - 1). \quad (14)$$

В рассматриваемой области магнитных полей энергетические уровни  $E_1$  и  $E_2$  приобретают существенную зависимость от магнитного поля, что приводит к аномальному наклону уровней Ландау:

$$\begin{aligned} \frac{dE_{20}}{d\hbar\omega_c} &= \frac{dE_{11}}{d\hbar\omega_c} = \frac{3}{2} - \mathcal{E}_C (I_{12} - I_{11}) \frac{df_{20}}{d\hbar\omega_c} \\ &= \frac{I_{12} + 3I_{21} - I_{11} - 3I_{22}}{2I}. \end{aligned} \quad (15)$$

При этом расстояние между последовательными уровнями Ландау, принадлежащими одной и той же подзоне размерного квантования, остается равным циклотронной энергии в соответствии с формулой (7) и теоремой Кона [6].

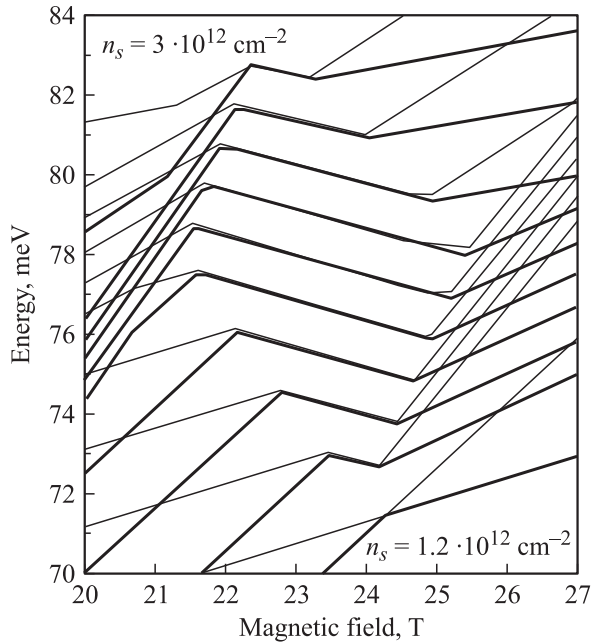
### 3. Численные результаты и обсуждение

В качестве конкретного приложения полученных выше аналитических результатов рассмотрим прямоугольную квантовую яму GaAs шириной  $L = 200 \text{ \AA}$ , считая барьеры достаточно высокими. Разность энергий между первыми уровнями размерного квантования в такой квантовой яме  $e_2 - e_1 \approx 56 - 14 = 42 \text{ мэВ}$ . Магнитное поле, соответствующее пересечению уровней (1,1) и (2,0), находится из условия  $\hbar\omega_c = e_2 - e_1$ , что дает  $B^* \approx 23 \text{ Тл}$ . При концентрации носителей  $n_s = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  система находится в состоянии с фактором заполнения  $\nu \approx 1.8$  (в расчете на вырожденные по спину уровни Ландау). Расчет интегралов (10), (11) несложен для случаев прямоугольной и параболической квантовых ям, соответствующие результаты приведены в таблице. Подставляя численные значения параметров в формулу (14), получаем для ширины области, в которой происходит вырождение уровней,  $\Delta B/B^* \approx 0.13$ , что соответствует промежутку магнитных полей приблизительно в 3 Тл. При этом наклон уровней Ландау в аномальной области дается формулой (15):

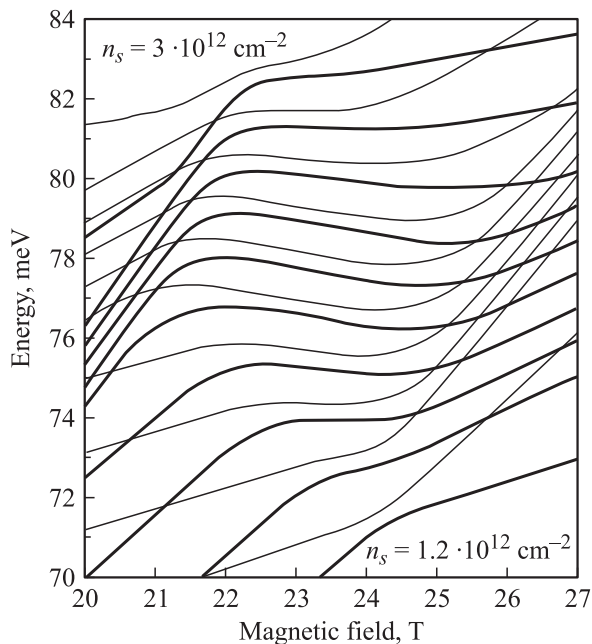
$$\frac{dE_{20}}{d\hbar\omega_c} = \frac{dE_{11}}{d\hbar\omega_c} = \frac{I_{12} + 3I_{21} - I_{11} - 3I_{22}}{2I} = -0.5. \quad (16)$$

Таким образом, имеются достаточно широкие области концентраций (магнитных полей), в которых уровни Ландау, принадлежащие разным уровням размерного квантования, оказываются вырожденными и имеют отрицательный наклон. Данный вывод подтверждают и результаты численного решения согласованной системы уравнений Шредингера и Пуассона (4), (5), приведенные на рис. 1. Аналогичным образом численный расчет

QW potential	$I_{11}$	$I_{12} - I_{21}$	$I_{22}$	$I$
Rectangular	0.103	0.135	0.151	0.016
Parabolic	0.399	0.598	0.698	0.100



**Рис. 1.** Спектр электронных состояний вблизи точки пересечения первого возбужденного уровня Ландау, относящегося к основной подзоне размерного квантования, и основного уровня Ландау, относящегося к первой возбужденной подзоне размерного квантования, для различных концентраций носителей. Случай поперечного магнитного поля.



**Рис. 2.** Спектр электронных состояний вблизи точки пересечения первого возбужденного уровня Ландау, относящегося к основной подзоне размерного квантования, и основного уровня Ландау, относящегося к первой возбужденной подзоне размерного квантования, для различных концентраций носителей. Случай наклонного магнитного поля (угол наклона относительно оси квантовой ямы  $\alpha = 2^\circ$ ).

спектра электронных состояний с учетом самосогласованного электростатического потенциала может быть выполнен в случае наклонного магнитного поля, однако, поскольку в этом случае переменные не разделяются, необходимо численное решение двумерного уравнения Шредингера. Результаты такого расчета для тех же параметров, но слегка наклоненного магнитного поля ( $\alpha = 2^\circ$ ), приведены на рис. 2. Как и в случае строго перпендикулярного магнитного поля, вид спектра носителей с учетом самосогласованного электростатического потенциала существенно отличается от рассчитанного без его учета. Поскольку по соображениям симметрии ветви зависимости  $E(B)$ , соответствующие состояниям (1,1) и (2,0), не могут пересекаться, вблизи от точки их возможного пересечения возникает щель, величина которой быстро падает по мере смещения в область больших или меньших магнитных полей. При учете же самосогласованного электростатического потенциала величина щели остается практически постоянной в том же диапазоне магнитных полей, ширина которого описывается формулой (14).

#### 4. Заключение

Как показывает построенная аналитическая теория, кулоновское взаимодействие носителей может существенно изменить спектр одноэлектронных состояний, а вместе с ним — и вид осцилляций Шубникова–де Гааза и де Гааза–ван Альфена. Согласно проведенным нами оценкам, свойства двумерного электронного газа в квантовых ямах с высокой концентрацией носителей должны резко меняться в некоторой, достаточно широкой области магнитных полей (концентрация) вблизи точек пересечения уровней Ландау, относящихся к разным уровням размерного квантования. Причем такие особенности должны наблюдаться не только в поперечной, но и в наклонной ориентации магнитного поля. Этот случай особенно интересен, поскольку варьируя угол наклона магнитного поля можно управлять величиной энергетической щели между уровнями Ландау, при этом ее величина не должна меняться в некотором диапазоне концентраций/магнитных полей.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (08-02-01337-а) и Федеральной программы поддержки ведущих научных школ. А.А. Грешнов благодарит за поддержку Фонд „Династия“ и Фонд содействия отечественной науке.

#### Список литературы

- [1] J. Sanchez-Dehesa, F. Meseguer, F. Borondo, J.C. Maan. *Phys. Rev. B*, **36**, 5070 (1987).
- [2] S. Trott, G. Paasch, G. Gobsch, M. Trott. *Phys. Rev. B*, **39**, 10 232 (1989).
- [3] Ikai Lo, J.K. Tsai, P.C. Ho, W.J. Yao, C.H. Chang, J.-C. Chiang, Li-Wei Tu, Q.X. Zhao. *Phys. Rev. B*, **67**, 195 317 (2003).

- [4] M.R. Schaapman, U. Zeitler, P.C.V. Christianen, J.C. Maan, D. Reuter, A.D. Wieck, D. Schuh, M. Bichter. Phys. Rev. B, **68**, 193 308 (2003).
- [5] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (М., Наука, 1989) §112.
- [6] W. Kohn. Phys. Rev., **123**, 1242 (1961).

*Редактор Л.В. Беляков*

## **Effects of self-consistent electrostatic potential in the quantum wells with several size-quantization levels in strong magnetic fields**

*A.A. Greshnov, G.G. Zegrya*

Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** The influence of self-consistent electrostatic potential of the spectrum of two-dimensional electron states in strong magnetic field is studied under the condition of more than one filled size-quantization subband. The cases of magnetic field directed perpendicular to the quantum well plane and tilted magnetic field are considered. In the case of perpendicular magnetic field it is shown that two or more Landau levels belonging to the different size-quantization subbands can be degenerate in some regions of magnetic fields/concentrations. Inclination of magnetic field from the growth direction leads to the opening of energy gap between these levels, however the gap remains almost constant as a function of concentration/magnetic field in the same range of parameters.