

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ "МОСКОВСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА"

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

На правах рукописи

МАНЦЕВИЧ ВЛАДИМИР НИКОЛАЕВИЧ

Неравновесные эффекты и нестационарный электронный
транспорт в полупроводниковых наноструктурах с
межчастичным взаимодействием

Специальность 01.04.10 — Физика полупроводников

Диссертация на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

МОСКВА - 2014

Оглавление

Введение	6
Глава 1. Литературный обзор	29
§ 1.1 Низкочастотная составляющая спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$	29
§ 1.2 Особенности локальной плотности состояний в окрестности примесных атомов и дефектов поверхности	37
§ 1.3 Интерференционные эффекты при туннелировании через локализованные состояния. Эффект Фано	44
§ 1.4 Роль кулоновских корреляций при туннелировании через связанные квантовые точки	50
§ 1.5 Электронные квантовые насосы	61
§ 1.6 Нестационарные эффекты в наноструктурах. Релаксация заряда в квантовых точках	65
§ 1.7 Выводы	74
Глава 2. Исследование пространственного распределения локальной туннельной проводимости на поверхности полупроводниковых кристаллов в присутствии кулоновских корреляций локализованных электронов	78
§ 2.1 Пространственное распределение электронной плотности состояний вблизи примесных атомов на поверхности полупроводников	79
§ 2.2 Особенности туннельных спектров в окрестности примесных атомов	89
§ 2.3 Интерференционные эффекты при туннелировании через локализованные состояния. Эффект Фано	92
§ 2.4 Эффект Фано при наличии кулоновского взаимодействия локализованных на примеси электронов	95
§ 2.5 Влияние перенормировки туннельных матричных элементов за счет кулоновского взаимодействия на локальную туннельную проводимость	106

§ 2.6	Влияние потенциала доменной стенки, на локальную плотность поверхностных состояний	110
§ 2.7	Выводы	116
Глава 3. Теоретическое исследование спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне частот при туннелировании через зарядовые локализованные состояния		118
§ 3.1	Формирование низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании электронов через одно зарядовое локализованное состояние	118
§ 3.2	Формирование низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании через два зарядовых локализованных состояния	128
§ 3.3	Формирование высокочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании через зарядовые локализованные состояния	144
§ 3.4	Сдвиг низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока в высокочастотную область при туннелировании через зарядовые локализованные состояния	151
§ 3.5	Выводы	160
Глава 4. Кулоновские корреляции при туннелировании через примесные комплексы и систему сильно связанных квантовых точек		163
§ 4.1	Основные кинетические уравнения для неравновесной электронной плотности в системе с двумя уровнями энергии	163
§ 4.2	Туннельные характеристики двухуровневой системы в приближении, учитывающем средние значения электронных чисел заполнения и парные корреляционные функции локализованных электронов	170
§ 4.3	Туннельные характеристики двухуровневой системы в приближении, учитывающем средние значения электронных чисел заполнения и корреляционные функции локализованных электронов всех порядков	181

§ 4.4	Зарядовые и спиновые конфигурации в связанных квантовых точках, индуцированные протеканием туннельного тока	194
§ 4.5	Выводы	207
Глава 5. Релаксация заряда в системе связанных квантовых точек в отсутствии кулоновских корреляций		211
§ 5.1	Нестационарные процессы в одиночной квантовой точке, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра резервуара .	212
§ 5.2	Нестационарные процессы в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара	215
§ 5.3	Модель неадиабатического электронного зарядового насоса на основе связанных квантовых точек	222
§ 5.4	Выводы	234
Глава 6. Роль межчастичного взаимодействия при релаксации заряда в системе связанных квантовых точек		237
§ 6.1	Нестационарные туннельные процессы в связанных квантовых точках, взаимодействующих с резервуаром, при наличии кулоновского взаимодействия	237
§ 6.2	Особенности бифуркационного режима релаксации заряда в связанных квантовых точках	248
§ 6.3	Пленение заряда в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с резервуаром	255
§ 6.4	Особенности релаксации заряда в связанных квантовых точках, вызванные наличием электрон-фононного взаимодействия	269
§ 6.5	Выводы	279
Глава 7. Нестационарные эффекты в связанных квантовых точках с кулоновскими корреляциями		282
§ 7.1	Особенности релаксации заряда в связанных квантовых точках с учетом кулоновских корреляций локализованных электронов .	282
§ 7.2	Аналитическое решение задачи о временной эволюции чисел заполнения в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара	287
§ 7.3	Временная эволюция электронных чисел заполнения в связанных квантовых точках	294

§ 7.4 Выводы	303
Заключение	304
Литература	309

Введение

Актуальность темы диссертации. Тенденция миниатюризации устройств микро- и нанoeлектроники требует разработки ключевых модулей нанометровых, а в перспективе и субнанометровых размеров с заранее заданными электронными свойствами, где в роли активных элементов будут использованы атомные и молекулярные кластеры или связанные квантовые точки. Уменьшение размеров и понижение размерности приводит к необходимости корректного теоретического описания электронных свойств неравновесных наноструктур с сильными электронными корреляциями. В таких системах существенную роль начинают играть нестационарные процессы, которые вызывают перераспределение заряда между электронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями.

Современные возможности по конструированию и изготовлению объектов нанометровых масштабов позволяют формировать системы сверхмалых размеров на основе взаимодействующих примесных атомов, дефектов или низкоразмерных структур на поверхности элементарных полупроводников и полупроводниковых соединений (квантовых точек, квантовых нитей или доменных границ). Повышенный интерес к таким структурам обусловлен их привлекательностью как с технологической и инженерной точек зрения для создания современных устройств нанoeлектроники, так и с точки зрения исследования ряда фундаментальных физических явлений: многочастичных кулоновских корреляций, электрон-фононного взаимодействия, модификации локальной электронной структуры вблизи локализованных состояний, нестационарной релаксация заряда и неравновесного электронного транспорта.

Одной из задач современной нанoeлектроники является создание условий для обеспечения высокоскоростного высокоточного одноэлектронного транспорта. Детальное исследование особенностей электронного транспорта в системах сверхмалых размеров с сильными кулоновскими корреляциями позволит применять такие многочастичные эффекты как инверсная заселенность, отрицательная дифференциальная проводимость, пространственное перераспределение заряда, зарядовые бифуркации, пле-

нение заряда, релаксация зарядовой плотности и т.д. для получения полупроводниковых наноструктур с заданными электронными свойствами и создания на их основе новых типов приборов наноэлектроники: сверхбыстрых зарядовых переключателей, устройств динамической памяти, основанных на переключении между несколькими стабильными состояниями, одноэлектронных квантовых насосов и турникетов, высокочастотных усилителей и детекторов, функционирующих на эффекте резонансного туннелирования, аналоговых преобразователей, микросенсоров и излучателей, генерирующих сверхкороткие импульсы. Еще одним важным применением является создание эталона тока и частоты, функционирующего при характерных значениях тока в наноамперы с рабочими частотами в гигагерцы.

Одной из возможностей для управления электронными свойствами в твердотельных наноструктурах является введение в полупроводниковую матрицу на стадии ее изготовления примесных атомов. В результате, примесные атомы, имплантированные в подповерхностные слои полупроводниковой структуры, образуют зарядовые локализованные состояния, что приводит к перераспределению электронов проводимости в полупроводнике. Таким образом, наличие примесных атомов в полупроводниковой матрице приводит к изменению локальных электронных свойств системы.

Понимание микроскопической природы процессов, происходящих при наличии примесных атомов, позволит создавать базовые элементы твердотельной электроники нанометровых размеров с заданными характеристиками. В этой области в настоящее время остаются нерешенными до конца проблемы контролируемого изменения электронной плотности под воздействием напряжения, контроля над числом атомов, определения местоположения имплантированных примесных атомов, влияния межчастичного взаимодействия на свойства электронного транспорта и корректного описания туннельной связи между примесным атомом и резервуаром. В связи с этим актуальной является проблема роли зарядовых локализованных состояний, образованных низкоразмерными структурами на поверхности элементарных полупроводников и полупроводниковых соединений, в формировании характерных особенностей туннельных характеристик наноструктур.

Фундаментальным ограничением, определяющим параметры электронного транспорта в твердотельных наноструктурах, является фликкершум. Уменьшение размеров современных устройств микро- и наноэлектроники, необходимое для увеличения скоростей передачи и повышения плот-

ности информации, ограничено возрастанием фликкер шума, что приводит к уменьшению соотношения сигнал/шум. В связи с этим необходимо понять микроскопическую природу фликкер шума и определить роль межчастичных корреляций в его формировании, что позволит в дальнейшем исследовать механизмы подавления шума со спектром $1/f^\alpha$ в полупроводниковых наноструктурах.

Особый интерес представляют процессы нестационарного электронного транспорта и релаксации заряда в системах связанных квантовых точек. Современные технологии роста квантовых точек позволяют с высокой точностью контролировать такие параметры точек как размер, форма и энергетический спектр. Системы квантовых точек дают принципиальную возможность для контролируемого манипулирования локализованным зарядом на характерных масштабах порядка десятков нанометров и могут быть использованы при создании электронных устройств, основанных на квантовой кинетике индивидуальных локализованных состояний. В настоящее время остается нерешенным вопрос контролируемого переключения систем сверхмалых размеров между устойчивыми состояниями. Особенности электронного транспорта в квантовых точках определяются величиной кулоновских корреляций, электрон-фононным взаимодействием, амплитудами туннельных переходов и топологией системы. Одной из наиболее существенных и нерешенных в настоящее время в этой области проблем является проблема временной эволюции заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра термостата, при наличии межчастичных корреляций.

Существующие методы теоретического анализа неравновесных наноструктур с сильными электронными корреляциями (метод функциональной ренорм-группы [1], квантовые методы Монте-Карло [2], динамическое приближение среднего поля [3] и т.д.) не позволяют описать наблюдаемые особенности электронного транспорта в случае, когда величина кулоновского взаимодействия сопоставима с расстоянием между одноэлектронными уровнями энергии локализованных состояний или с ширинами уровней, обусловленными туннельной связью с состояниями непрерывного спектра. Соответственно, возникает проблема развития взаимосвязанных теоретических подходов и методов корректного описания особенностей нестационарного электронного транспорта в неравновесных наноструктурах с сильными электронными корреляциями без введения малого пара-

метра по величине кулоновского взаимодействия. Учитывая современное состояние исследований неравновесных эффектов и особенностей нестационарного электронного транспорта в наноструктурах при наличии сильного межчастичного взаимодействия, можно сформулировать цель диссертационной работы.

Цель диссертационной работы состояла в разработке новых методов теоретического описания особенностей неравновесной кинетики, статистических характеристик и нестационарных эффектов при электронном транспорте через полупроводниковые наноструктуры с сильным межчастичным взаимодействием, а также в установлении электронных свойств неравновесных наноструктур с сильными корреляциями.

Для достижения поставленной цели были рассмотрены следующие локальные задачи:

1. Разработать теоретическую модель, позволяющую исследовать на микроскопическом уровне роль многочастичных эффектов в формировании сингулярных особенностей в спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Установить с помощью предложенной модели механизм возникновения низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$ в окрестности состояний, локализованных на поверхности полупроводников.
2. Исследовать особенности туннельных характеристик в условиях существования нескольких конкурирующих каналов для транспорта электронов в неравновесных наноструктурах с зарядовыми локализованными состояниями. Выявить влияние кулоновских корреляций локализованных электронов на вид локальных спектров туннельной проводимости.
3. Разработать теоретические методы, позволяющие проводить анализ транспортных свойств электронных систем сверхмалых размеров с точным учетом кулоновских корреляций локализованных электронов во всех порядках и исследовать особенности туннельных характеристик таких систем в широком диапазоне параметров. Особое внимание будет уделено исследованию систем с конечным значением величины кулоновского взаимодействия, которое может быть сопостави-

мо с характерным расстоянием между уровнями энергии исследуемой системы.

4. Детально проанализировать влияние кулоновских корреляций локализованных электронов в неравновесных наноструктурах на динамику зарядовых и спиновых конфигураций многочастичных состояний; проанализировать поведение электронных чисел заполнения на уровнях энергии и полных электронных чисел заполнения; исследовать туннельные характеристики для различных соотношений между параметрами системы (положением уровней энергии, величиной кулоновского взаимодействия, амплитудами туннельных переходов).
5. Проанализировать временную эволюцию заряда, локализованного в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара, при наличии кулоновских корреляций и электрон-фононного взаимодействия. Выявить основные закономерности релаксации заряда, изменяя в широком диапазоне параметры исследуемой системы. Определить возможные законы релаксации заряда и рассмотреть особенности, возникающие при временной эволюции заряда в системах, состоящих из большого числа квантовых точек.
6. Разработать метод для описания временной эволюции заряда в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующими с состояниями непрерывного спектра, позволяющий выйти за рамки приближения среднего поля и выявить особенности релаксации заряда с учетом кулоновских корреляций всех порядков между локализованными электронами. На основе предложенного метода проанализировать динамику локализованных электронов.

Научная новизна: работы состоит в разработке теоретических методов исследования неравновесных эффектов и нестационарного электронного транспорта в сильно коррелированных полупроводниковых системах нанометровых размеров и в выявлении новых эффектов, связанных с сильными межчастичными корреляциями, которые коренным образом изменяют туннельные характеристики исследуемых систем.

В диссертации сформулированы и обоснованы научные положения и выводы, которые в совокупности составляют крупный вклад в научное направление - нестационарный электронный транспорт в наноструктурах с сильными межчастичными корреляциями. Развитие данного направления основано на применении разработанных методов теоретического анализа кулоновских корреляций и электрон-фононного взаимодействия с помощью самосогласованного исследования кинетики туннельных процессов в неравновесных наноструктурах на основе уравнений Гейзенберга для многочастичных электронных состояний, точно учитывающих корреляционные функции локализованных в наноструктурах электронов, и диаграммной техники для неравновесных процессов с использованием псевдочастиц. В частности:

- Предложена и обоснована теоретическая модель, позволившая объяснить сингулярное поведение низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$ на микроскопическом уровне и проанализировать влияние многочастичных корреляций на спектральную плотность туннельного тока в широком диапазоне напряжений.
- Предложен теоретический метод, позволивший исследовать характерный вид особенностей пространственного распределения локальной электронной плотности в окрестности поверхностных локализованных состояний, образованных отдельными примесными атомами при существовании нескольких каналов для туннелирования электронов с учетом кулоновского взаимодействия локализованных электронов.
- Разработан теоретический подход, который впервые позволил детально проанализировать электронный транспорт и туннельные характеристики сильно коррелированных электронных систем с несколькими уровнями энергии при точном учете кулоновских корреляций локализованных электронов. Развитый подход позволил исследовать влияние кулоновских корреляций локализованных электронов в структурах сверхмалых размеров на динамику многочастичных состояний с различными зарядовыми и спиновыми конфигурациями и проанализировать поведение электронных чисел заполнения этих состояний в широком диапазоне параметров системы.

- Предложена теоретическая модель, описывающая релаксацию заряда, локализованного в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара, при наличии кулоновских корреляций и электрон-фононного взаимодействия. Обнаружена возможность временной эволюции заряда в связанных квантовых точках в бифуркационном режиме и показано, что при увеличении числа точек в предложенной системе происходит "пленение" заряда, несмотря на наличие диссипации.
- Разработан теоретический подход для анализа временной эволюции заряда в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующими с состояниями непрерывного спектра, позволяющий выйти за рамки приближения среднего поля и впервые точно учесть корреляции локализованных в наноструктурах электронов.

Научная и практическая значимость

- Разработанная и апробированная теоретическая модель, описывающая формирование в области туннельного контакта низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, позволяет идентифицировать типы примесных атомов и их зарядовые состояния по особенностям низкочастотной составляющей спектров туннельного тока.
- Проведенное в работе исследование влияния изолированных примесных атомов и дефектов поверхности на локальную плотность состояний систем нанометровых размеров имеет определяющее значение для диагностики глубины залегания примесных атомов и для исследования локальных характеристик электронного транспорта в современных приборах твердотельной микро- и наноэлектроники.
- Развитый теоретический подход, позволяющий анализировать электронный транспорт и туннельные характеристики сильно коррелированных электронных систем, позволил обнаружить возникновение инверсной заселенности, отрицательной туннельной проводимости и многократного перераспределения заряда в таких системах: эти эффекты можно использовать для создания обратимых зарядовых пе-

реключателей, элементов динамической памяти и квантовых излучателей, генерирующих импульсы заданной частоты.

- Проведено теоретическое обоснование возможности формирования и контролируемой модификации многоэлектронных состояний с заданной зарядовой и спиновой конфигурацией в сильно связанных квантовых точках или примесных кластерах путем изменения напряжения на затворе.
- Предложен новый тип электронных устройств сверхмалых размеров - неадиабатический электронный насос, который можно использовать в качестве эталона тока, а также для стабилизации частоты в приборах современной наноэлектроники.
- Разработанный метод анализа временной эволюции заряда в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями позволил выявить особенности релаксации заряда, которые можно использовать для создания активных элементов наноэлектроники, основанных на сверхбыстром обратимом переключении между несколькими стабильными состояниями, а также для разработки зарядовых ловушек на основе систем связанных квантовых точек.

Положения, выносимые на защиту:

1. Выявлена определяющая роль локализованных состояний, образованных отдельными примесными атомами, в формировании туннельных характеристик в системах пониженной размерности и в структурах с характерными размерами, сравнимыми с радиусом локализации примесей в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Предложен теоретический подход, позволивший исследовать характерный вид особенностей локальной электронной плотности в окрестности поверхностных локализованных состояний, образованных отдельными примесными атомами с кулоновским взаимодействием при существовании нескольких каналов для туннелирования электронов. Показано, что кулоновское взаимодействие определяет форму и ширину линии резонансных особенностей. Данный подход позволил по виду спектров локальной туннельной проводимости проанализиро-

вать влияние кулоновского взаимодействия на кинетические характеристики исследуемой системы.

2. Предложена и апробирована теоретическая модель, объясняющая на микроскопическом уровне сингулярное поведение низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$ при туннелировании электронов через зарядовые локализованные состояния. Показано, что $1/f^\alpha$ компонента спектральной плотности туннельного тока связана с изменением зарядов локализованных состояний при протекании туннельного тока, приводящим к изменению кулоновского потенциала, на котором происходит многократное рассеяние электронов проводимости.

С использованием предложенной модели обнаружено, что перенормировка амплитуд туннельных переходов при учете кулоновского взаимодействия локализованных электронов с электронами непрерывного спектра в берегах туннельного контакта может приводить к появлению сингулярных особенностей в высокочастотной области спектра туннельного тока и к сдвигу сингулярных особенностей из низкочастотной области в высокочастотную область при изменении напряжения смещения на туннельном контакте.

3. Развита теоретический подход, позволяющий анализировать электронный транспорт и туннельные характеристики сильно коррелированных электронных систем сверхмалых размеров. В предложенном подходе точно учтены кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках по взаимодействию.
4. Показано, что кулоновские корреляции приводят к формированию инверсной заселенности в двухуровневой электронной системе. Продемонстрировано, что изменение параметров туннельного контакта позволяет обнаружить и исследовать конкуренцию двух механизмов, отвечающих за неравновесное заполнение уровней энергии (в том числе и возникновение инверсной заселенности): изменение соотношения между скоростями туннельных переходов в различные берега контакта и кулоновские корреляции локализованных электронов. С использованием предложенного метода анализа сильно коррелированных неравновесных электронных систем продемонстрировано, что

кулоновские корреляции вызывают обратимое перераспределение заряда между одноэлектронными состояниями системы. Обнаружены области значений напряжения на туннельном контакте, для которых наблюдается отрицательная туннельная проводимость, как следствие кулоновских корреляций в области контакта.

5. Выявлено, что полные электронные числа заполнения в системе сильно связанных квантовых точек могут уменьшаться с ростом величины напряжения за счет кулоновских корреляций локализованных электронов. Обнаружено перераспределение заряда между двухэлектронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями (синглетным и триплетным состояниями) при изменении напряжения на туннельном контакте, обусловленное наличием кулоновских корреляций локализованных электронов. Выявлено, что для определенных значений параметров системы, заполнение триплетного состояния может превосходить заполнение синглетного состояния.
6. Теоретически обоснована возможность создания нового типа электронных устройств сверхмалых размеров на основе трех связанных квантовых точек: неадиабатического электронного насоса. Выявлены условия возникновения ненулевого среднего туннельного тока, протекающего через систему при нулевом напряжении на туннельном контакте, обусловленного различными величинами скоростей релаксации при резонансном и нерезонансном туннелировании между квантовыми точками. Показана возможность использования таких устройств в качестве эталонов тока, а также для стабилизации частоты в приборах современной нанoeлектроники. Предложенный механизм формирования нестационарного туннельного тока может проявляться при комнатных температурах для квантовых точек нанометрового размера.
7. Предложен метод описания релаксации заряда в связанных квантовых точках, основанный на применении диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов и метода среднего поля, позволяющего учесть кулоновское взаимодействие в неравновесных наноструктурах. С помощью предложенного метода обнаружено, что немонотонная релаксация заряда в квантовых точках при наличии

кулоновского взаимодействия является результатом перераспределения заряда между каналами релаксации в отдельных точках, а не между каналами релаксации разных точек. В системе связанных квантовых точек с кулоновским взаимодействием обнаружен и исследован бифуркационный режим релаксации заряда. Показано, что момент резкой смены скорости релаксации можно варьировать, изменяя параметры системы. Эффект резкого переключения между двумя устойчивыми режимами релаксации можно использовать для создания сверхбыстрых зарядовых переключателей. Исследована временная эволюция заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии электрон-фононного взаимодействия. Показано, что учет электрон-фононного взаимодействия приводит к увеличению скорости релаксации заряда.

8. Предложена и исследована система связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующая с состояниями непрерывного спектра, в которой с ростом числа точек происходит принципиальное изменение кинетики релаксации заряда, помещенного в одну из точек, не взаимодействующих непосредственно с непрерывным спектром. Показано, что в такой системе заряд практически полностью остается локализованным в начальной точке, несмотря на наличие диссипации. Процесс можно рассматривать как "пленение" заряда, а систему квантовых точек - как "зарядовую ловушку".
9. Предложен метод описания процессов релаксации заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с термостатом, основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые применены для многочастичных электронных состояний. Данный подход позволил получить систему уравнений, которая точно учитывает кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках, и вычислить точно все корреляторы для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии. Показано, что система уравнений, учитывающая кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках, имеет точное аналитическое решение. Предложенный подход позволил обнаружить эффект динамического пленения заряда в системе связанных квантовых точках с кулоновскими корреляциями, взаимодей-

ствующих с термостатом. Показано, что существует особый режим релаксации заряда с резким уменьшением амплитуды и последующим почти полным ее восстановлением, который может быть применен для создания на основе связанных квантовых точек обратимых зарядовых переключателей.

Обоснованность и достоверность Результаты, представленные в диссертации, получены на основе численных вычислений с использованием тщательно протестированных компьютерных программ. Обоснованность и достоверность определяются использованием современных методов теоретической физики, корректностью постановки задачи и адекватностью применяемых математических моделей; результаты работы подтверждены многократной проверкой развитых в работе методов в известных предельных случаях, а также сравнением с данными опубликованных экспериментальных работ. Они неоднократно доложены на семинарах, российских и международных конференциях по проблемам, связанным с тематикой диссертационной работы. Основные результаты опубликованы в ведущих российских и международных научных журналах. Это позволяет считать полученные результаты обоснованными и достоверными, а также полностью отвечающими современному мировому уровню исследований. Представленные на защиту результаты являются новыми и получены впервые.

Личный вклад: Автор внес определяющий личный вклад в работу, в том числе в формулировку основных идей развитых в диссертации теоретических подходов, а также в развитие теории нестационарного электронного транспорта в неравновесных наноструктурах с электронными корреляциями. Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены автором лично, либо при его непосредственном участии.

Структура и объем диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, 7 глав, заключения и списка литературы. Объем работы составляет **337** страниц, включая **97** рисунков. Список литературы содержит **297** наименований.

Во введении дана общая характеристика диссертации: обоснована актуальность темы; сформулированы цели работы, научная новизна

и практическая ценность полученных результатов; перечислены основные положения, выносимые на защиту; приведены сведения об апробации результатов, основных публикациях, объеме и структуре работы.

В главе 1 проведен анализ литературных данных по экспериментальному и теоретическому исследованию особенностей электронного транспорта в неравновесных полупроводниковых микро- и наноструктурах. Литературный анализ позволил сделать вывод о том, что исследования неравновесных эффектов и нестационарного электронного транспорта в структурах сверхмалых размеров с электронными корреляциями в настоящее время являются актуальными и крайне востребованными в связи с потребностями современной наноэлектроники в электронных устройствах, функционирующих на основе управляемого электронного транспорта. Несмотря на большое количество работ в этой области, существует ряд явлений, физические причины возникновения которых требуют более глубокого анализа, а, следовательно, необходимо создание новых методов и подходов для анализа неравновесных свойств и нестационарного электронного транспорта в наноструктурах с сильными корреляциями.

Глава 2 посвящена изучению локальной туннельной проводимости на поверхности полупроводников в окрестности индивидуальных примесных атомов и низкоразмерных структур при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Показано, что отдельные примесные атомы приводят к значительной модификации вида локальной плотности состояний, которая проявляется во "включении" и "выключении" примесного атома в локальной туннельной проводимости при изменении расстояния от примеси. Наличие на поверхности полупроводника одномерного возмущающего потенциала, приводит к возникновению осцилляций в пространственном распределении локальной плотности поверхностных состояний в направлении перпендикулярном одномерному дефекту.

Исследовано влияние кулоновского взаимодействия локализованных электронов на вид спектров локальной туннельной проводимости в окрестности глубоких и мелких примесных атомов. Продемонстрировано, что кулоновское взаимодействие локализованных электронов приводит к существенному изменению формы и ширины линии. Обнаружено, что при наличии как прямого канала туннелирования между состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта, так и резонансного канала туннелирования через примесный атом, в спектрах локальной туннельной

проводимости происходит формирование Фано резонансов, обусловленных интерференцией между каналами.

Глава 3 посвящена теоретическому исследованию спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Предложена теоретическая модель, учитывающая эффекты многократного рассеяния электронов проводимости на кулоновском потенциале, создаваемым зарядом локализованного состояния в области туннельного контакта, изменяющимся в процессе туннелирования электронов. Разработанная модель позволила объяснить микроскопическую природу низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, связанного с состояниями, локализованными на поверхности полупроводников. Обнаружено, что учет кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра может приводить не только к формированию сингулярных особенностей в низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока, но и к образованию высокочастотных сингулярных особенностей. Выявлено, что перенормировка амплитуд матричных элементов в туннельном контакте при учете кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра приводит к сдвигу низкочастотных сингулярных особенностей в спектрах туннельного тока в высокочастотную область.

Глава 4 посвящена исследованию особенностей электронного транспорта в наноструктурах с несколькими уровнями энергии при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов. Предложен новый метод описания процессов в такой системе, основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые могут быть записаны либо для чисел заполнения электронов, локализованных на уровнях энергии либо для псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы. Разработанный подход позволил точно учесть кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках для случая слабой связи с берегами туннельного контакта, и точно вычислить все корреляционные функции для конечной величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии, то есть предложено реалистическое описание систем с сильными кулоновскими корреляциями.

Обнаружено, что при протекании туннельного тока кулоновские корреляции локализованных электронов приводят к принципиально новому распределению зарядовой плотности в двухуровневой системе. Примене-

ние псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы позволило получить информацию о зарядовых и спиновых конфигурациях состояний с разным числом электронов и проанализировать поведение полных электронных чисел заполнения, чисел заполнения отдельных многоэлектронных состояний, а также исследовать туннельные характеристики сильно связанных систем для различных положений одноэлектронных уровней энергии относительно уровня Ферми образца.

Показано, что кулоновские корреляции в двухуровневой системе приводят к инверсной заселенности и к обратимому перераспределению заряда между одноэлектронными состояниями системы. Найдено, что кулоновские корреляции отвечают за появление отрицательной туннельной проводимости.

В **Главе 5** исследованы особенности релаксации заряда в одноуровневых связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара, без учета кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Продемонстрировано, что в таких системах существует несколько каналов для релаксации заряда с различными характерными величинами скоростей релаксации. Показано, что временная эволюция заряда в системе определяется соотношениями между параметрами системы: положением уровней энергии, амплитудами туннельных переходов, скоростями релаксации в состоянии непрерывного спектра.

Предложена система, состоящая из трех связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, которая может быть применена для создания нового типа электронных устройств сверхмалых размеров: неадиабатического электронного насоса. Обнаружено возникновение в такой системе ненулевого среднего туннельного тока, протекающего при нулевом напряжении на туннельном контакте, обусловленного различием скоростей релаксации при резонансном и нерезонансном туннелировании. Предложенный механизм формирования нестационарного туннельного тока может проявляться при комнатных температурах для квантовых точек нанометрового размера.

Глава 6 посвящена исследованию особенностей релаксации заряда, локализованного в связанных квантовых точках, взаимодействующих с резервуаром, при наличии межчастичного взаимодействия. Исследование роли кулоновского взаимодействия в формировании особенностей временной

эволюции заряда проведено методом среднего поля. Обнаружено, что кулоновское взаимодействие приводит к немонотонной релаксации заряда в квантовых точках в результате перераспределения заряда между каналами релаксации в отдельных точках, а не между каналами релаксации разных точек.

Обнаружен особый бифуркационный режим релаксации в связанных квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия. Показано, что момент смены скоростей релаксации можно варьировать за счет изменения параметров системы. Выявлено, что с ростом числа квантовых точек происходит принципиальное изменение процесса релаксации заряда. Заряд практически полностью остается локализованным в начальной точке, несмотря на наличие в системе диссипации. Таким образом, происходит "пленение" заряда в системе квантовых точек, а саму систему можно рассматривать как "зарядовую ловушку".

Исследована временная эволюция заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии электрон-фононного взаимодействия. Показано, что электрон-фононное взаимодействие приводит к увеличению скорости релаксации локализованного заряда. Увеличение скорости релаксации определяется параметрами системы: расстройкой между уровнями энергии, оптической фононной частотой и отношением между константой электрон-фононного взаимодействия и амплитудами туннельных переходов. В случае положительной расстройки между уровнями энергии влияние электрон-фононного взаимодействия на релаксацию локализованного заряда выражено наиболее сильно. В случае отрицательной начальной расстройки учет электрон-фононного взаимодействия приводит к возникновению осцилляций в зависимости чисел заполнения от времени. Наличие осцилляций обусловлено процессами поглощения и испускания фононов при переходах между уровнями энергии в квантовых точках.

В **Главе 7** предложен метод, позволяющий описать процессы релаксации в связанных квантовых точках точно учитывая кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии. Предложенный теоретический подход позволил предсказать эффект динамического пленения заряда в связанных квантовых точках с кулоновскими корреляциями, взаимодействующих с тер-

мостатом, который является прямым следствием наличия в системе кулоновских корреляций. Показано, что существует особый режим релаксации заряда с резким уменьшением амплитуды и последующим ее восстановлением, который может быть применен для создания на основе связанных квантовых точек обратимых зарядовых переключателей. Проведено сравнение результатов, полученных в работе с учетом электронных корреляций, с результатами, полученными при использовании метода среднего поля. Найдено, что существуют области значений параметров, для которых метод среднего поля не позволяет корректно описать временную эволюцию системы.

В заключительной части диссертационной работы сформулированы основные выводы по результатам работы, и приведен список цитируемой литературы.

Апробация работы.

По теме диссертации опубликовано **35** научных работ из которых **17** - тезисы докладов на конференциях и **18** - статьи в ведущих российских и зарубежных реферируемых журналах: "Письма в ЖЭТФ"; "ЖЭТФ"; "Известия РАН: серия физическая"; "Solid State Communications"; "European Physical Journal B"; "Physical Review B". Результаты работы неоднократно докладывались и обсуждались на российских и международных конференциях, основные из которых следующие:

1. 14-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".

Июнь 26-30, 2006, Санкт-Петербург, Россия.

V. N. Mancevich, A.I. Oreshkin, S. I. Oreshkin, I. V. Radchenko, S. V. Savinov, N. S. Maslova, D. A. Muzychenko, and V. I. Panov.

$1/f^\alpha$ tunneling current noise characteristics in the vicinity of individual impurity atoms on clean InAs(110) surface.

2. 15-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".

Июнь 25-29, 2007, Санкт-Петербург, Россия.

V. N. Mancevich, A.I. Oreshkin, S. I. Oreshkin, S. V. Savinov, N. S. Maslova, D. A. Muzychenko, and V. I. Panov.

Atomic-scale study of the impurity atoms effect on the $1/f^\alpha$ noise characteristics of the tunneling current from individual InAs(110) atomic sites.

3. XV международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов".

Апрель 8-11, 2008, Москва, Россия.

В. Н. Манцевич, Д. А. Музыченко, А. И. Орешкин, С. И. Орешкин, В. И. Панов, Н. С. Маслова, С. В. Савинов.

Исследование спектральных характеристик туннельного тока в присутствии примесных атомов на поверхности монокристалла InAs (110) методом сканирующей туннельной микроскопии.

4. 17th Annual Conference of Doctoral Students "WDS'08".

June 3-6, 2008, Prague, Czech Republic.

V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, A. I. Oreshkin, S. I. Oreshkin, D. A. Muzychenko, V. I. Panov, S. V. Savinov.

The influence of localized state charging on $1/f^\alpha$ tunneling current noise spectrum.

5. Международный симпозиум "Low Dimensional Systems".

Сентябрь 5-9, 2008, Ростов-на-Дону, Россия.

В. Н. Манцевич, Н. С. Маслова, А. И. Орешкин, С. И. Орешкин, Д. А. Музыченко, В. И. Панов, С. В. Савинов.

Влияние локализованных зарядовых состояний на низкочастотную составляющую спектра туннельного тока вида $1/f^\alpha$.

6. 17-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".

Июнь 22-26, 2009, Минск, Белоруссия.

V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, A.I. Oreshkin, V. I. Panov.

Wide range tunneling current noise spectra singularities formed by charged localized states.

7. 17-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".
Июнь 22-26, 2009, Минск, Белоруссия.
S. V. Savinov, D. A. Muzychenko, V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, V. I. Panov, K. Schouteden, C. Van Haesendonk.
Spatial oscillations of the density of states near domain boundaries on the Ge (111) 2×1 surface studied by LT STM/STS.
8. 18th Annual Conference of Doctoral Students "WDS'09".
June 2-5, 2009, Prague, Czech Republic.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova.
Spatial distribution of local density of states in vicinity of impurity on semiconductor surface.
9. Научная конференция "Ломоносовские чтения", секция физика.
Апрель 16-25, 2010, Москва, Россия.
В. Н. Манцевич, Н. С. Маслова, А. И. Орешкин, В. И. Панов.
Исследование туннельного тока в присутствии примесных атомов на поверхности полупроводников методом сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии.
10. 18-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".
Июнь 21-26, 2010, Санкт-Петербург, Россия.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova.
Spatial effects of Fano resonance in local tunneling conductivity in the presence of impurity on semiconductor surface.
11. 25th International Conference of Physical Students "ICPS'10".
August 17-23, 2010, Graz, Austria.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova.
Spatial distribution of local tunneling conductivity in vicinity of impurity on semiconductors.

12. VIII International Conference "Nanoscale".
August 31- September 3, 2010, Basel, Switzerland.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, A. I. Oreshkin, S. I. Oreshkin.
The impurity atoms effect on the flicker noise characteristics of the tunneling current from individual InAs (110) atomic sites.
13. International Scanning Probe Microscopy Conference "ISPM 2011".
June 19-22, 2011, Munchen, Germany.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, A. I. Oreshkin, S. I. Oreshkin.
Tunneling current noise spectra singularities influenced by localized states charging.
14. 11th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures "ACSIN 2011".
October 3-7, 2011, St.-Petersburg, Russia.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, A. I. Oreshkin, S. I. Oreshkin.
Atomic-scale study of localized state charging influence on the singularities formation in tunneling current spectrum.
15. International Conference on Nanoscience + Technology "ICNT 2012".
July 23-27, 2012, Paris, France.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, P. I. Arseyev.
Non-stationary effects and charge trapping in the system of interacting quantum dots.
16. XVII Международный симпозиум "Нанопизика и Наноэлектроника".
Март 11-15, 2013, Нижний Новгород, Россия.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, P. I. Arseyev.
Charge trapping in the system of coupled quantum dots with on-site Coulomb repulsion.
17. 21-й Международный симпозиум "Наноструктуры: Физика и технология".
Июнь 24-28, 2013, Санкт-Петербург, Россия.
V. N. Mantsevich, N. S. Maslova, P. I. Arseyev.

Coulomb correlations influence on the local spatial charge redistribution in a two-level system.

Основные результаты опубликованы в следующих работах:

1. A.I. Oreshkin, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, D.A. Muzychenko, S.I. Oreshkin, V.I. Panov, S.V. Savinov, P.I. Arseev/ The influence of different impurity atoms on $1/f^\alpha$ tunneling current noise characteristics on InAs (110) surface // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т.85, № 11, С. 46–51.
2. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ The influence of localized state charging on $1/f^\alpha$ tunneling current noise spectrum // Solid State Communications. 2008. V.147, P. 278–283.
3. В.Н. Манцевич, Н.С. Маслова, А.И. Орешкин, С.И. Орешкин, Д.А. Музыченко, В.И. Панов, С.В. Савинов/ Влияние локализованных зарядовых состояний на низкочастотную составляющую спектра туннельного тока вида $(1/f^\alpha)$ // Известия РАН: серия физическая. 2009. Т.73, № 7, С. 940–942.
4. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ Tuning of tunneling current noise spectra singularities by localized states charging // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т.89, №1, С. 26–31.
5. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ Spatial distribution of local density of states in vicinity of impurity on semiconductor surface // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т.89, №12, С. 713–717.
6. D.A. Muzychenko, S.V. Savinov, V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, V.I. Panov, K. Schouteden, K. van Haesendonk/ Low temperature scanning tunneling microscopy and spectroscopy of spatial oscillations in the density of states near domain boundaries at the Ge (111) 2×1 surface // Physical Review B. 2010. V.81, P. 035313.
7. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ Spatial effects of Fano resonance in local tunneling conductivity in vicinity of impurity on semiconductor surface // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т.91, №3, С. 150–153.

8. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ Different behavior of local tunneling conductivity for deep and shallow impurities due to Coulomb interaction // Solid State Communications. 2010. V.150, P. 2072–2075.
9. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova/ The influence of tunneling matrix element modification due to on-site Coulomb interaction on local tunneling conductivity // Solid State Communications. 2011. V.151, P. 659–662.
10. P.I. Arseyev, N.S. Maslova, V.N. Mantsevich/ Correlation induced switching of local spatial charge distribution in two-level system // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т.94, №5, С. 422–428.
11. P.I. Arseev, N.S. Maslova, V.N. Mantsevich/ The effect of Coulomb correlations on the nonequilibrium charge redistribution tuned by a tunneling current // ЖЭТФ. 2012. Т.142, №1, С. 156–168.
12. P.I. Arseev, N.S. Maslova, V.N. Mantsevich/ Non-adiabatic electron charge pumping in coupled semiconductor quantum dots // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т.95, №10, С. 589–594.
13. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev/ Localized charge bifurcation in the coupled quantum dots // Solid State Communications. 2012. V.152, P. 1545–1550.
14. P.I. Arseyev, N.S. Maslova, V.N. Mantsevich/ Coulomb correlations effects on localized charge relaxation in the coupled quantum dots // European Physical Journal B. 2012. V.85, №7, P. 249.
15. P.I. Arseyev, N.S. Maslova, V.N. Mantsevich/ Charge and spin configurations in the coupled quantum dots with Coulomb correlations induced by tunneling current // European Physical Journal B. 2012. V.85, №12, P. 410.
16. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev/ Non-stationary effects in the coupled quantum dots influenced by the electron-phonon interaction // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т.97, №6, С. 398–403.
17. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseyev/ Charge trapping in the system of interacting quantum dots // Solid State Communications. 2013. V.168, P. 36–41.

18. V.N. Mantsevich, N.S. Maslova, P.I. Arseev/ Non-stationary effects in the system of coupled quantum dots influenced by the Coulomb correlations // *ЖЭТФ*. 2014. T.145, №1, С. 156–169.

ГЛАВА 1

Литературный обзор

§ 1.1. Низкочастотная составляющая спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$

Неравновесные эффекты и нестационарный электронный транспорт в твердотельных наноструктурах являются объектами интенсивных теоретических и экспериментальных исследований на протяжении многих лет. В последние десятилетия в связи с уменьшением размеров базовых элементов, используемых в твердотельной микро- и наноэлектронике, возникла фундаментальная проблема влияния электронных корреляций и сильного межчастичного взаимодействия на электронный транспорт в структурах сверхмалых размеров. Зарядовые локализованные состояния, образованные примесными атомами или дефектами кристаллической решетки, значительно влияют на кинетические и статистические свойства транспортных характеристик систем сверхмалых размеров, а также приводят к изменению их спектра и плотности состояний. Основным обстоятельством, вызывающим сложности при анализе систем с сильными межчастичными корреляциями, является неприменимость теории возмущений, вызванная тем, что самым большим параметром в системе становится величина взаимодействия. Поэтому стандартный подход, развитый для описания процессов электронного транспорта в твердотельных наноструктурах, становится неприменимым.

В настоящее время определяющая роль межчастичных корреляций в формировании особенностей электронного транспорта в твердотельных наноструктурах широко подтверждена экспериментальными данными, полученными методом сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии (СТМ/СТС). Применение метода СТМ/СТС позволяет получать наиболее полную информацию об особенностях проводимости и изменениях невозмущенной плотности состояний в структурах сверхмалых размеров, вызванных наличием межчастичных корреляций.

Современные технологии дают возможность контролируемым обра-

зом создавать искусственные системы нанометровых размеров - квантовые точки, на основе которых можно конструировать электронные устройства сверхмалых размеров с высокой степенью контроля параметров создаваемой системы (размер, форма, энергетический спектр). Помимо промышленного применения, квантовые точки являются удачными объектами для исследования таких фундаментальных научных проблем как: многочастичные электронные корреляции, неравновесный электронный транспорт, нестационарные релаксационные процессы и пространственное перераспределения заряда. Кроме того, процессы интеграции структур сверхмалых размеров в базовые элементы твердотельной наноэлектроники напрямую связаны с анализом неравновесных и нестационарных эффектов, обусловленных сильными межчастичными корреляциями, определяющих особенности электронного транспорта. Для анализа особенностей электронного транспорта в таких системах требуется разработка общей теории, учитывающей сильные многочастичные корреляции и неравновесную кинетику электронов.

Одним из фундаментальных ограничений, определяющих параметры электронного транспорта в твердотельных наноструктурах является фликкер шум [4, 5]. Прогресс в области информационных технологий напрямую связан с уменьшением размеров устройств микро- и наноэлектроники, получаемых на основе структур металл-диэлектрик-полупроводник. Уменьшение размеров базовых элементов, необходимое для увеличения скорости передачи и плотности записи информации, ограничено ростом уровня фликкер шума. Возрастание уровня фликкер шума приводит к уменьшению отношения сигнал/шум, что ухудшает характеристики не только обычных транзисторов, но и значительно ограничивает свойства таких элементов как вибраторы, излучатели, аналоговые преобразователи, микро-сенсоры и генераторы. Типичные толщины диэлектриков, используемых в современных транзисторах, составляют около одного нанометра. При таких характерных масштабах необходимо четко понимать микроскопическую природу формирования фликкер шума и знать является ли шум поверхностным или объемным эффектом.

В настоящий момент, несмотря на значительное число экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию этого явления [6–44], природа шума со спектром $1/f^\alpha$ до конца не изучена. Особый интерес представляет исследование природы фликкер шума в графене и

топологических изоляторах - современных материалах, имеющих большую перспективу для применения в микро- и наноэлектронике [45–49]. Кроме того, важным является вопрос о механизмах воздействия на шум со спектром $1/f^\alpha$ с целью его подавления [36, 38, 48].

Фликкер шум с момента обнаружения в 1922 году [4] и первых попыток объяснения природы возникновения [5] был обнаружен в сотнях объектов самого различного происхождения (полупроводниковые сопротивления, сопротивления на основе металлов, потенциалы биологических клеток, малоамплитудные осцилляции земной коры и т.д.) [50–54].

В тех немногих случаях, когда природа шума установлена, этот тип шума возникает в результате суперпозиции шумов от отдельных флуктуаторов с известной природой. Обычно для объяснения низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$ рассматривают ансамбль двухуровневых систем со случайным временем релаксации τ_0 , функция распределения вероятностей которого имеет вид A/τ_0^α [54–56]. Тогда суперпозиция лоренцианов, распределенных с надлежащим статистическим весом, дает спектральную плотность шума со спектром $1/f^\alpha$.

В работах [7–9, 57, 58] обсуждаются вопросы о физических явлениях, вызывающих низкочастотные флуктуации туннельного тока в контактах сверхмалых размеров. Авторы работы [7] в качестве возможной причины формирования фликкер шума называют эффект кулоновской блокады. В работе [8] появление низкочастотных флуктуаций связывается с процессами адсорбции и десорбции атомов на поверхности иглы и образца в области туннельного контакта. В работе [9] наличие шума туннельного тока со спектральной плотностью мощности вида $1/f^\alpha$ объяснено поверхностной диффузией адсорбированных молекул в области туннельного контакта. Показано, что величина показателя степени α увеличивается при понижении температуры исследуемой туннельной системы. В работах [57, 58] появление шума со спектром $1/f^\alpha$ в металлических пленках связывают с наличием дефектов и их миграцией в образцах.

Свойства флуктуаций туннельного тока при туннелировании через нульмерные структуры подробно исследованы в работах [10–13, 15, 59]. Авторы [10–12] изучали возникновение низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$ вблизи квантовых точек InAs в структуре GaAs-AlAs-GaAs при низких температурах (1,4–4,0К), чтобы избежать влияния тепловых шумов. В работе [10] установлено, что шум со спектром $1/f$ дает основной вклад в

спектральную плотность туннельного тока на частотах не превышающих 20 кГц. Обнаружено возрастание спектральной плотности шума туннельного тока при резонансном туннелировании через квантовую точку и спад вдали от резонанса.

Авторами [13] исследована низкочастотная составляющая спектров туннельного тока в одиночной грануле марганца, сформированной в эпитаксиальных пленках, для различных значений температуры, магнитного поля и тока смещения на туннельном контакте. Показано, что при температурах ниже температуры Кюри в области низких частот в спектральной плотности туннельного тока доминирует шум со спектром $1/f$. При значении температуры 4,2К появляется дополнительный вклад в шум от лоренцевых компонент, вызванный флуктуирующими кластерами взаимодействующих магнитных моментов.

В работе [59] обнаружено появление сингулярностей в туннельном токе, протекающем между двумерным вырожденным электронным газом и нульмерным локализованным состоянием. Сингулярный пик появлялся, когда энергетический уровень локализованного состояния совпадал с уровнем Ферми двумерного электронного газа. С понижением температуры амплитуда пика возрастала. Авторы связывают возникновение сингулярности с кулоновским взаимодействием между туннелирующими электронами локализованного состояния и электронами проводимости в берегах туннельного контакта.

В работах [14, 16, 17, 37] проведены исследования низкочастотного шума туннельного тока в мезоскопических системах. Авторы [14] рассматривали мезоскопические туннельные контакты, сформированные на основе гетероструктур, и обнаружили нелинейную зависимость низкочастотного шума от величины туннельного тока в случае наличия локализованных состояний в области туннельного барьера. В работе [16] исследована низкочастотная составляющая спектров туннельного тока при резонансном туннелировании через два зарядовых локализованных состояния в области контакта и продемонстрировано, что кулоновское взаимодействие между зарядовыми локализованными состояниями приводит к увеличению вклада низкочастотного шума в спектральную плотность туннельного тока.

Одним из наиболее актуальных вопросов микро- и наноэлектроники был и остается вопрос о том, где происходит генерация фликкер шума: на поверхности или в объеме проводников и полупроводников

[46–48, 56, 60–63]. Отсутствие ответа на этот вопрос было связано с неспособностью создавать однородные металлические или полупроводниковые пленки с характерными толщинами порядка нескольких нанометров. Большая часть созданных моделей, описывающих в той или иной степени причины формирования фликкер шума, относится к конкретным материалам или специфическим системам с особым образом выбранными геометриями. С экспериментальной точки зрения ответ на вопрос о месте генерации фликкер шума может быть получен с использованием многослойных пленок графена на основе измерений для образцов с различным количеством слоев [47, 48]. Авторы [47] обнаружили, что шум со спектром $1/f$ генерируется в основном поверхностью в случае, когда число слоев не превышает семи. В случае, когда число слоев превосходит семь, фликкер шум является объемным эффектом.

Теоретический анализ причин возникновения низкочастотного шума со спектром $1/f$ проведен во многих работах [18–38, 59, 64–66]. Анализ большинства предлагаемых моделей основан на использовании диаграммной техники для неравновесных процессов [20–27, 65, 66] или первопринципных расчетов [28–31]. Среди рассматриваемых моделей наибольшее число работ посвящено изучению квантовых точек [23–26, 32–34] или двухуровневых систем со случайным временем релаксации и заданной функцией распределения [18, 19, 54–56].

В работе [18] исследованы процессы резонансного туннелирования в структуре с двойным барьером при наличии динамических дефектов и учете взаимодействия с термостатом. Динамический дефект имеет внутренние степени свободы и может переключаться между двумя или более метастабильными состояниями при взаимодействии с термостатом. Таким образом, динамический дефект является двухуровневой системой. Спектр шума туннельного тока имел вид $1/f$ в случае большого количества дефектов в системе. Предложенная модель имеет большое число степеней свободы, учитывает не только взаимодействие с термостатом, но и электрон-фононное взаимодействие, и поэтому представляется сложной.

Авторами работы [19] изучено образование низкочастотного шума со спектром $1/f$ в допированных полупроводниках. В качестве механизма образования шума предложена модель переходов многоэлектронных кластеров, образованных примесными атомами, между двумя состояниями. Число переходов уменьшается экспоненциально с ростом характерных раз-

меров кластеров. Большие времена, необходимые для формирования шума со спектром $1/f$, достигаются малыми вероятностями одновременного туннелирования большого числа локализованных электронов и высокими значениями энергии активации для их последовательной перегруппировки. Показана возможность применения рассмотренной модели для качественного объяснения экспериментальных результатов, полученных при низких температурах для арсенида галлия, допированного кремнием.

В работе [38] рассмотрена одномерная мезоскопическая система с подобранной специальным образом геометрией, состоящая из N туннельных контактов, образованных $(N-1)$ локализованными состояниями, расположенными между двумя электродами. Авторы искусственно ввели в модель дополнительные источники шума туннельного тока с изначально определенным спектром. При большом числе локализованных состояний спектральная плотность туннельного тока на промежуточных частотах оказывается пропорциональной величине $\omega^{-1/3}$. В [38] показано, что при низких температурах свойства спектров туннельного тока зависят от геометрии рассматриваемой системы и электронной плотности в области между электродами.

При наличии в туннельном контакте локализованных состояний и учете перенормировки спектра, связанной со взаимодействием между электронными состояниями в берегах контакта, невозможно описание процессов туннелирования, основанное на использовании равновесной функции распределения туннелирующих частиц.

В этом случае для описания туннельных процессов можно использовать диаграммную технику для неравновесных процессов, дающую возможность самосогласованным образом учесть одновременно перенормировку исходного спектра системы за счет туннельных процессов и релаксацию неравновесных частиц [67]. Методом диаграммной техники для неравновесных процессов исследованы зависимости спектральной плотности туннельного тока от напряжения на нулевой частоте в мезоскопических системах с различной геометрией [20–22, 24, 27, 35] и предложены механизмы образования низкочастотного шума в квантовых точках [23, 25, 26, 32–34].

Выражения для спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте получены в работах [22, 27]. Авторы [22] исследовали зависимость спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте от величины кулоновского взаимодействия электронов на узле в одномерной

атомной цепочке. В работе [27] проанализирована спектральная плотность туннельного тока на нулевой частоте в квантовых проволоках, находящихся во внешнем магнитном поле, при различных значениях параметров системы.

В работе [21] теоретически исследована спектральная плотность туннельного тока в системе с беспорядком, который получен с помощью введения случайного гауссова потенциала. Предложенная модель применима для малых значений напряжений на туннельном контакте и учитывает поправки к току, связанные с электрон-электронным взаимодействием в неравновесном полупроводнике.

Авторы [20] получили выражение для флуктуаций в цилиндрическом туннельном контакте в случае, когда значение напряжения на контакте зависит от времени. Показано, что импульсное напряжение приводит к флуктуациям тока, зависящим от фазы. В случае постоянного тока на контакте происходит трехкратное уменьшение амплитуды низкочастотного шума, что соответствует результатам, полученным в работе [36], где эффект уменьшения объяснен неупругим рассеянием электронов и отсутствием шума в открытых квантовых каналах.

В работе [24] методом неравновесных функций Грина исследован низкочастотный шум при неупругом туннелировании в системе связанных квантовых точек. Проведен анализ влияния неупругого рассеяния электронов на флуктуации тока в квантовой точке, взаимодействующей со слабо неравновесными берегами туннельного контакта. В этом случае отсутствует необходимость учитывать многочастичные эффекты, связанные с взаимодействием термостата и квантовой точки. Многочастичная задача с учетом электрон-фононного взаимодействия сведена к задаче о многоканальном одноэлектронном рассеянии. Авторы исследовали зависимость спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте от величины напряжения на туннельном контакте и показали применимость модели в области высоких напряжений. Однако, наибольший интерес представляет изучение зависимости спектральной плотности туннельного тока от напряжения на туннельном контакте в широком диапазоне частот.

Авторы [35] исследовали шум в квантовом резисторе и произвели вычисления корреляционных функций системы всех порядков. Причиной возникновения низкочастотных флуктуаций назван принцип Паули. В работе [64] показана необходимость учета не только принципа Паули, но

и кулоновского взаимодействия при описании генерации низкочастотного шума в туннельном контакте.

Теоретическое исследование вольт-амперных характеристик туннельного тока, протекающего через локализованное состояние в диэлектрическом слое, проведено в работе [65]. Авторы учитывали, что при туннелировании электрона из локализованного состояния в состояния непрерывного спектра туннельного контакта происходит формирование положительного заряда на локализованном состоянии. Показано, что возникновение степенных сингулярностей на вольт-амперных характеристиках при пороговом значении напряжения на туннельном контакте происходит вследствие кулоновского взаимодействия между электронами и зарядовым локализованным состоянием. Обнаруженный эффект аналогичен возникновению сингулярностей при поглощении гамма-квантов глубокими примесными уровнями в металлах. При этом происходит возбуждение электрона с глубокого уровня в зону проводимости. На образовавшемся в результате кулоновском потенциале может происходить внутризонное рассеяние электронов проводимости, что приводит к формированию сингулярностей в спектральной плотности [65, 66].

В работах [32–34] показана связь спектра низкочастотного шума с корреляциями тока и зарядовыми флуктуациями на квантовой точке при протекании тока через одиночную квантовую точку или через пару связанных точек. Вычисления проведены для конечных значений напряжений смещения на туннельном контакте в предположении низких температур в системе. Интенсивность низкочастотного шума зависит от величины взаимодействия квантовой точки с каждым из берегов туннельного контакта и от взаимного расположения резонансного уровня энергии квантовой точки и химических потенциалов в берегах контакта.

Влияние атомной геометрии и межатомного расстояния на свойства низкочастотного шума в точечных алюминиевых контактах изучено с применением первопринципных расчетов [28]. На основе результатов, полученных при исследовании низкочастотного шума с использованием матрицы коэффициентов прохождения через барьер, был сделан вывод о возможности использования свойств низкочастотного шума для получения информации о химических свойствах поверхности [30, 31].

Исследование низкочастотного шума на нулевой частоте методом функционала плотности проведено в работе [29]. Свойства шума проана-

лизированы при помощи квазичастичной волновой функции, полученной самосогласованным образом из теории функционала плотности. В качестве примера применения предложенного метода рассмотрено возникновение низкочастотного шума в нити из атомов кремния, находящейся между двумя металлическими электродами. Продемонстрирована нелинейность зависимости амплитуды низкочастотного шума от напряжения.

Таким образом, в большинстве теоретических работ, описывающих в той или иной степени причины формирования в туннельном контакте низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, рассмотрены конкретные материалы или специфические модельные мезоскопические системы со специальным образом подобранной геометрией. Особенности спектральной плотности туннельного тока обычно исследуется на нулевой частоте или в узком диапазоне напряжений на туннельном контакте, и только в отдельных работах для конкретных материалов проведен анализ спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне частот при отличных от нуля значениях напряжения смещения на туннельном контакте.

§ 1.2. Особенности локальной плотности состояний в окрестности примесных атомов и дефектов поверхности

В настоящее время одним из наиболее развивающихся научных направлений является исследование физических процессов в структурах сверхмалых размеров при наличии локализованных состояний, образованных индивидуальными примесными атомами и дефектами, в том числе процессов, происходящих на поверхности полупроводников. В связи с уменьшением геометрических размеров базовых элементов, применяемых в современной твердотельной наноэлектронике и функционирующих на основе эффектов изменения локальной плотности состояний, существует фундаментальная проблема влияния зарядовых локализованных состояний, образованных примесными атомами или дефектами решетки, на кинетические и статистические свойства структур сверхмалых размеров. Размеры современных электронных приборов настолько малы, что одиночные примесные атомы напрямую влияют на их электронные свойства [68]. Даже в равновесном случае локализованные состояния изменяют исходный спектр и плотность состояний рассматриваемой системы. С другой стороны сами примесные атомы можно использовать как функциональные

составляющие для современных твердотельных электронных приборов.

Понимание особенностей электронного транспорта через зарядовые локализованные состояния позволит реализовать устройства для передачи, хранения и кодирования информации на базе отдельных примесных атомов [69–71]. Важным этапом на пути реализации этой задачи является создание наноструктур с затворами на базе одиночных примесных атомов, для которых можно модифицировать энергетический спектр за счет взаимодействия с состояниями непрерывного спектра окружения или изменения положения примеси в полупроводниковой матрице.

Можно сформулировать следующие основные проблемы, которые не позволяют в настоящее время создавать электронные приборы (нанотранзисторы) на основе одиночных примесных атомов: 1. Неконтролируемое изменение электронной плотности стока и истока при изменении напряжения на затворе. 2. Формирование заданной конфигурации на основе фиксированного числа примесных атомов. 3. Контроль над положением имплантированных примесных атомов. 4. Адекватное описание туннельных процессов между уровнями энергии примесных атомов и состояниями непрерывного спектра резервуаров [72].

Ответ на поставленные вопросы может быть найден при помощи совместных экспериментальных и теоретических исследований особенностей локальной плотности состояний в окрестности примесных атомов и дефектов в туннельных контактах сверхмалых размеров.

Для экспериментальных исследований влияния локализованных состояний, обусловленных различными примесными атомами, дефектами поверхности или молекулами адсорбата, на особенности электронного транспорта в твердотельных наноструктурах наиболее подходящим является метод СТМ/СТС [73–77]. Результаты исследований локальной плотности состояний в окрестности примесных атомов в наноструктурах подробно представлены в работах [78–99].

В работах [78–83, 85, 89, 90, 92–94] методом СТМ/СТС проведены исследования свойств локализованных состояний, образованных примесными атомами на поверхности полупроводниковых соединений типа A_3B_5 . Авторы показали, что степень модификации локальной плотности поверхностных состояний определяется типом примесных атомов, глубиной залегания в полупроводниковой матрице и зарядовым состоянием. В работах [90, 92] продемонстрировано формирование круговых осцилляций в локаль-

ной плотности поверхностных состояний в окрестности примесных атомов серы и теллура при положительном и отрицательном напряжении на туннельном контакте соответственно. Авторы [90] связывают такой вид плотности состояний с процессами рассеяния электронов на примесных атомах, находящихся в объеме полупроводниковых монокристаллов InAs. В работе [92] для объяснения полученных результатов предложена модель туннелирования электронов через зарядовое локализованное состояние в области контакта. Появление заряда связывается с неравновесным распределением электронов в туннельном контакте из-за конечных скоростей релаксации электронов при низких температурах.

Формирование характерных особенностей треугольной формы в окрестности локализованных состояний, образованных примесными атомами цинка на поверхности арсенида галлия при низких температурах, обнаружено в работе [93]. Авторы считают, что треугольная форма особенностей, сформированных примесными атомами, обусловлена модификацией плотности состояний вблизи потолка валентной зоны. Детальные спектроскопические исследования показали, что форма особенностей в плотности состояний зависит не только от глубины залегания примеси, но и от расстояний вдоль поверхности между зондом СТМ и локализованным состоянием.

Большое внимание привлекли экспериментальные исследования влияния нульмерных [86, 88] и одномерных [87, 100] поверхностных структур на локальную плотность поверхностных состояний. В работе [86] с помощью низкотемпературной сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии изучена локальная плотность состояний в нульмерной полупроводниковой структуре (треугольные дефекты, образованные кристаллами арсенида индия на поверхности пленки InAs, выращенной на подложке GaAs (111) методом молекулярно-лучевой эпитаксии). Авторы обнаружили осциллирующую круговую структуру локальной плотности электронных состояний в окрестности нульмерных дефектов. Локальная плотность состояний внутри треугольных особенностей принимает тороидальный вид и для туннелирующих электронов с энергиями, принадлежащими интервалам, соответствующим разности энергий соседних уровней, превосходит по амплитуде локальную плотность на поверхности вблизи нульмерных структур.

Особенности пространственного распределения локальной плотности

состояний в окрестности изолированных и двойных квантовых ям на поверхности скола гетероструктуры InAs/GaSb вдоль плоскости (110) исследованы при помощи низкотемпературного сканирующего туннельного микроскопа в работе [88]. При значениях напряжения смещения, соответствующих зоне проводимости InAs, в локальной плотности состояний для одиночной квантовой ямы обнаружены периодические осцилляции в направлении роста гетероструктуры. Период осцилляций обратно пропорционален величине напряжения на туннельном контакте.

В работе [87] изучены одномерные электронные системы, образованные вблизи атомарных ступеней на поверхности InAs (110) и содержащие одну или две заполненные подзоны. Методом низкотемпературной СТМ/СТС были определены энергии подзон и исследована локальная плотность состояний одномерных электронных структур. Для анализа экспериментальных результатов проведены теоретические расчеты, основанные на одночастичной модели, которые показали, что изменение локальной плотности состояний вызвано электрон-электронным взаимодействием.

Авторы [100] продемонстрировали формирование стоячих волн электронной плотности в квантовых ямах различного размера, образованных на поверхности Si(001) — $c(4 \times 2)$ парой алюминиевых одномерных квантовых нитей. В работе показано, что наличие на поверхности искусственных низкоразмерных структур приводит к значительному изменению спектра поверхностных состояний. Авторами [101] предложено использовать продольное ограничение плотности состояний на поверхности в качестве механизма уменьшения заселенности уровней энергии поверхностных состояний.

В работах [102, 103] экспериментально изучены эффекты туннелирования через квантованные уровни энергии в низкоразмерных структурах при наличии кулоновского взаимодействия. Обнаружено, что при высоких напряжениях в локальной плотности состояний можно наблюдать появление дополнительных пиков, соответствующих возбужденному спектру квантованных уровней системы. Продемонстрировано, что амплитуда отдельного пика определяется величиной связи одночастичного состояния с состояниями непрерывного спектра в берегах контакта.

Кроме исследований, посвященных изучению влияния локализованных состояний, сформированных примесными атомами и квантовыми точками, на локальную плотность состояний, были экспериментально изуче-

ны эффекты модификации локальной плотности на поверхности полупроводников кремния и германия в присутствии потенциала, обусловленного наличием одномерных дефектов - доменных стенок [104–106]. В работах [107,108] показано, что плотность состояний на поверхности $\text{Si}(111) - (2 \times 1)$ и $\text{Ge}(111) - (2 \times 1)$ может изменяться и в отсутствие поверхностных дефектов за счет атомных рядов, дающих вклад в заполненные и незаполненные состояния поверхности, при изменении напряжения на туннельном контакте.

В работе [104] на поверхности $\text{Ge}(001)$ методами сканирующей туннельной микроскопии и фотоэмиссионной спектроскопии при температуре 80К обнаружены стоячие волны, связанные с поверхностными электронными состояниями в окрестности границ доменов. Локальная плотность поверхностных состояний имеет вид осциллирующей зависимости с экспоненциально спадающей амплитудой при увеличении расстояния от границы раздела. Исследование стоячих волн на поверхности $\text{Si}(100)$ и $\text{Ge}(100)$ проведено в работах [105, 106, 109]. Осцилляции в локальной плотности поверхностных состояний по мнению авторов относятся к незаполненной поверхностной зоне, связанной с оборванными связями. Авторы связывают наличие осцилляций с формированием стоячих волн при рассеянии электронов проводимости на доменных стенках. Тип доменной стенки определяет амплитуду и сдвиг фазы стоячей волны при рассеянии. Показано, что с увеличением напряжения на туннельном контакте происходит уменьшение периода осцилляций в плотности состояний в направлении перпендикулярном доменным стенкам.

Для теоретического анализа влияния примесных атомов, дефектов в приповерхностных слоях полупроводников и низкоразмерных поверхностных структур на локальную плотность состояний наиболее часто применяют метод функций Грина [91, 110–113], первопринципные расчеты [114–121], основанные на использовании метода функционала плотности, или решеточную модель с сильной связью [83, 95, 122].

Авторы [91] применяли метод функций Грина для объяснения природы фриделевских осцилляций вблизи примесных атомов кремния на поверхности арсенида галлия (110). В работе выполнен расчет эффектов экранировки подповерхностных примесных атомов аккумуляющим слоем электронов. Показано, что осцилляции вблизи примесного атома связаны с рассеянием электронов непрерывного спектра на потенциале зарядо-

вого локализованного состояния, образованного примесным атомом.

В работе [110] изучено влияние одиночных локализованных состояний на локальную плотность поверхностных состояний в монослойном и двухслойном графене. Экспериментально обнаружено, что для монослойного графена в плотности поверхностных состояний наблюдаются фриделевские осцилляции, связанные с внутриузельным рассеянием, для которых при удалении от локализованного состояния амплитуда уменьшается с расстоянием пропорционально r^{-2} . В случае междуузельного рассеяния спадание амплитуды фриделевских осцилляций происходит обратно пропорционально расстоянию r^{-1} . Для двухслойного графена спадание амплитуды осцилляций обратно пропорционально расстоянию r^{-1} как для внутриузельного, так и для междуузельного рассеяния. Для анализа экспериментальных данных методом функций Грина была рассмотрена решеточная модель с сильной связью, которая позволила качественно объяснить вид экспериментальной зависимости плотности состояний от расстояния.

Модификация локальной плотности состояний под действием неэкранированного кулоновского потенциала, связанного с зарядовым локализованным состоянием на поверхности графена, как функции энергии и расстояния исследована с использованием модели сильной связи в работе [122]. Наличие локализованного состояния приводит к потенциальному рассеянию электронов проводимости. В локальной плотности поверхностных состояний обнаружены три доминирующие при низких энергиях резонансные особенности. С увеличением расстояния от примесного атома происходит уменьшение вклада особенностей в локальную плотность состояний. В исследованной системе существует критическое значение кулоновской энергии. При значениях энергии ниже критического зависимость заряда локализованного состояния от расстояния носит осциллирующий характер и спадает с расстоянием пропорционально r^{-3} . При значениях энергии, превышающих критическое значение, зависимость заряда локализованного состояния от расстояния спадает с расстоянием пропорционально r^{-2} .

Выражение, описывающее зависимость тока, протекающего через мезоскопический туннельный контакт, от времени получено авторами работы [112] с использованием метода неравновесных функций Грина. Энергии электронов в области контакта изменялись зависящим от времени напряжением смещения. Зависимость туннельного тока от времени при туннелировании через двойной симметричный барьер имеет осциллирующий вид.

В работе [114] выполнены расчеты локальной плотности состояний для квантовых цепочек конечных размеров как функции дискретных значений энергии и расстояния вдоль цепочки. Расчеты произведены с использованием динамического метода ренорм-группы для матрицы плотности [1, 123]. Авторы показали, что локальная плотность обусловлена вкладами от большого числа дискретных состояний с различными спектральными весами.

Изучение локальных электронных свойств арсенида галлия и квантовых точек в гетероструктурах InAs/GaAs проведено в работе [95]. В расчетах использована решеточная модель в приближении сильной связи. Данная модель позволила исследовать изменения локальной плотности состояний, вызванные наличием дефектов и примесей на поверхности, не проводя диагонализацию гамильтониана системы. Расположение атомов исследуемой структуры, а также ширина запрещенной зоны, определены методом сканирующей туннельной микроскопии. Далее экспериментальные результаты использованы в расчетной модели в качестве начальных условий при изучении локальной плотности поверхностных состояний в присутствии квантовых точек. Было обнаружено, что локальная плотность поверхностных состояний максимальна над квантовой точкой. При удалении от квантовой точки происходит спад амплитуды плотности состояний. Сопоставление расчетных данных с экспериментальными результатами продемонстрировало качественное совпадение в поведении локальной плотности поверхностных состояний.

Численное моделирование пространственного распределения локальной плотности состояний на поверхности Ge(111) — (2×1) в присутствии различных типов примесных атома и дефектов поверхности на основе первопринципных расчетов проведено в работах [116–119]. Показано, что наличие локализованных состояний на поверхности значительно влияет на локальную плотность состояний на расстояниях до сорока ангстрем от места расположения примесного атома или дефекта поверхности. Кроме того, обнаружено, что различные типы дефектов по разному модифицируют поверхностную плотность состояний, что дает принципиальную возможность для идентификации типов дефектов и определения их зарядовых состояний исходя из результатов расчетов.

Таким образом, основным недостатком теоретических моделей, применяемых для исследования влияния примесных атомов и дефектов по-

поверхности на локальную плотность состояний, является пренебрежение изменением плотности состояний непрерывного спектра, вызванным взаимодействием электронов проводимости непрерывного спектра с примесными атомами. Кроме того, лишь в малом количестве работ проанализирована пространственная зависимость локальной туннельной проводимости, анализ которой позволяет делать выводы о типе примесных атомов и глубине их залегания в полупроводниковой матрице в связи с тем, что различные типы дефектов по разному модифицируют поверхностную плотность состояний.

§ 1.3. Интерференционные эффекты при туннелировании через локализованные состояния. Эффект Фано

На настоящий момент эффекты взаимодействия примесных состояний на поверхности и границах раздела металлов и полупроводниковых кристаллов с состояниями непрерывного спектра подложки являются слабо изученными, а эффекты неравновесного взаимодействия примесных состояний до сих пор остаются практически не исследованными. Одним из наиболее важных эффектов, возникающих в туннельных контактах с локализованными состояниями, позволяющих исследовать электронные корреляции в системах сверхмалых размеров, является эффект Фано [124] - эффект интерференции резонансного канала туннелирования электронов через локализованное состояние, образованное примесным атомом или квантовой точкой, и прямого канала туннелирования между состояниями непрерывного спектра. Эффект Фано приводит к появлению характерных особенностей туннельных характеристик исследуемых систем [125–129]. Даже в отсутствии кулоновского взаимодействия формируется типичная асимметричная форма линии в зависимости туннельной проводимости от напряжения на контакте. Такую форму линии можно наблюдать при исследовании линейного транспорта в системе множественных квантовых точек или при изучении методом сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии плотности состояний на поверхности металлов и полупроводников в окрестности примесных атомов [101, 115, 130–132]. Более симметричная лоренцева форма линии является предельным случаем асимметричной Фано формы линии, когда в исследуемой системе отсутствует интерференция между различными каналами туннелирования, на-

пример, когда нет нерезонансного канала для транспорта электронов [133].

Наиболее полные экспериментальные измерения вольт-амперных характеристик методом СТМ/СТС были выполнены в окрестности одиночных атомов Се на поверхности Ag [101] и в окрестности атомов Со на поверхности Au [131] и Cu [132]. В работе [131] методом СТМ/СТС показано, что при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов при температурах ниже температуры Кондо в окрестности примесных атомов возникает конкуренция между эффектом Кондо и эффектом Фано, что приводит к изменению формы линии в эффекте Фано и модификации Кондо пика. Авторы обнаружили, что форма линии туннельной проводимости, измеренной над магнитным примесным атомом кобальта на поверхности Au (111), является асимметричной, а не лоренцевой из-за интерференции между двумя каналами туннелирования - прямым и резонансным. Измерения локальных туннельных спектров продемонстрировали исчезновение асимметричной формы линии спектров туннельного тока при удалении от примесного атома на расстояние порядка 10 ангстрем.

Теоретический анализ пространственного распределения локальной туннельной проводимости в системе, состоящей из острого зонда СТМ, металлической поверхности и магнитного примесного атома, проведен в работе [126]. Авторы использовали модель Андерсона [130] для описания примесного атома, в которой величина кулоновского взаимодействия полагалась бесконечно большой, что позволило избежать эффектов, связанных с двойным заполнением магнитной примеси. Выражение, описывающее туннельную проводимость симметричного контакта, получено для режимов слабых туннельных токов с применением формализма функций Грина. Предложенная модель позволила воспроизвести форму линии, измеренную методом СТМ/СТС над примесными атомами в работе [131]. Пространственная зависимость туннельной проводимости от напряжения демонстрирует формирование резонансного пика при удалении от примесного атома вместо провала, полученного в случае, когда зонд СТМ расположен над примесным атомом. С увеличением расстояния и пик и провал исчезают из-за подавления интерференционных эффектов. Авторы [126] исследовали зависимость формы линии, измеренной над примесным атомом, от температуры и показали, что с ростом температуры происходит уширение резонансного пика и уменьшение его амплитуды. Также был рассмотрен случай неидеального неточечного туннельного контакта. В работе

[126] показано, что учет неточности туннельного контакта приводит к смене резонанса на антирезонанс и наоборот (пик переходит в провал, а провал - в пик). Одновременно происходит незначительное смещение резонанса в область более высоких частот. Используемая для описания состояний непрерывного спектра поверхности решеточная модель ограничивает область применения полученных в работе [126] результатов. Для полностью корректного сравнения с экспериментальными данными необходимо применять функции Грина, вычисленные для конкретной исследуемой поверхности.

Особенности туннельной проводимости в неточечных контактах с разной геометрией были теоретически проанализированы в работе [134] с применением формализма Келдыша в реальном пространстве. Авторы исследовали связь между дифференциальной туннельной проводимостью и локальной плотностью поверхностных состояний, варьируя геометрию контакта от точечной к планарной. Показано, что в этих предельных случаях проводимость значительно отличается. Основным, рассматриваемым авторами [134] вопросом, является вопрос о том, что измеряет острие зонда СТМ: плотность состояний или локальную плотность состояний? Было показано, что локальная туннельная проводимость пропорциональна плотности поверхностных состояний в случае точечного контакта в режиме слабой туннельной связи. С увеличением амплитуды туннельных переходов пропорциональность нарушается. Она также нарушается и в случае туннельного контакта с планарной геометрией. Авторы [134] продемонстрировали, что связь между локальной плотностью состояний и дифференциальной туннельной проводимостью может нарушаться из-за наличия эффектов интерференции между несколькими каналами туннелирования электронов.

Электронный транспорт через одиночную неравновесную примесь и одиночную квантовую точку, которые описаны примесной моделью Андерсона, был рассмотрен в работах [111] и [135] соответственно. В работе [111] неравновесность системы вводится в модель за счет различных значений химических потенциалов в берегах туннельного контакта, а исследования проведены с применением формализма теории возмущений по величине матричного элемента туннельных переходов между примесным атомом и берегами туннельного контакта. Также рассмотрен случай бесконечно большой величины кулоновского взаимодействия, что позволяет

ввести псевдочастичные операторы и избежать двойного заполнения электронных состояний. Данная модель дает возможность предсказать некоторые экспериментальные результаты, но авторы показывают, что между расчетами и результатами эксперимента существуют значительные расхождения как в области малых, так и в области больших напряжений на туннельном контакте.

В работе [135] модель Андерсона с бесконечным кулоновским взаимодействием применена для исследования неравновесного транспорта через квантовую точку с двумя глубокими уровнями энергии, слабо связанную с берегами туннельного контакта. Авторы показали, что в неравновесном случае в системе появляются новые энергетические масштабы, отличные от масштабов, характеризующих поведение системы в равновесном случае. Обнаружено резкое уменьшение дифференциальной проводимости с ростом напряжения на туннельном контакте в связи с тем, что разность химических потенциалов в берегах контакта превосходит ширину резонансного пика и в связи с тем, что уменьшение времени жизни уровня энергии приводит к уменьшению амплитуды пика.

Экспериментальные и теоретические исследования несимметричных особенностей, возникающих в спектрах локальной туннельной проводимости, измеренных в окрестности индивидуальных примесных атомов и молекул, позволили исследовать вопрос об особенностях переноса заряда между подложкой и адсорбатом [115]. В этой работе удалось связать наблюдаемую степень асимметрии пиков в локальной туннельной проводимости с особенностями электронной структуры адсорбата и степенью гибридизации с состояниями непрерывного спектра подложки. В [115] показано, что гибридизация молекулярных орбиталей и трансфер заряда непосредственно влияют на электронную конфигурацию, магнитный момент и транспортные свойства металло-органических комплексов, адсорбированных на металлической подложке.

В работе [129] авторы наблюдали формирование асимметричных Фано резонансов, возникающих в проводимости одноэлектронного транзистора из-за интерференции между резонансным и нерезонансным каналами туннелирования. Транспорт электронов исследован при низких температурах в режиме кулоновской блокады [136]. Особенностью исследуемой системы является возможность варьировать степень интерференции между каналами туннелирования при изменении напряжения на контакте. Рас-

сматриваемая система - одноэлектронный транзистор, представляет из себя помещенный между двумя берегами туннельного контакта примесный атом и может быть описана с помощью модели Андерсона [130, 135, 137, 138]. Авторы показали, что степень асимметричности Фано резонансов в исследуемой системе зависит от соотношения между амплитудами туннелирования резонансного и нерезонансного каналов, а ширина резонансных особенностей увеличивается с ростом температуры. В качестве возможного механизма изменения соотношения между амплитудами туннелирования в работе [129] предложено изменять напряжение на контакте.

Изучение Фано резонансов в структурах нанометровых размеров проведено в [128, 139, 140]. В работе [128] исследованы Фано резонансы в квазиодномерных системах, образованных донорными примесными атомами. Для описания электронного транспорта через донорную примесь авторы [128] использовали модифицированную двухзонную модель рассеяния электронов проводимости на примесном потенциале [140]. Показано, что Фано резонансы являются результатом интерференции между прямым и резонансным каналами электронного транспорта. Обнаружено, что Фано резонансы не исчезают в системе при учете большого количества подзон и могут возникать в "грязных" образцах (образцах с большой концентрацией примесных атомов). Авторы продемонстрировали, что Фано резонансы должны возникать в низкоразмерных электронных системах, в которых состояния непрерывного спектра в одном из резервуаров взаимодействуют как с состояниями непрерывного спектра в другом резервуаре, так и с дискретным уровнем энергии.

В работе [139] эффекты интерференции в симметричных квазиодномерных структурах исследованы с применением приближения S -матрицы. Авторы считают, что приближение S -матрицы не зависит от модели и является универсальным для описания общих особенностей резонансных линий в квазиодномерных структурах. Использовано приближение, которое не зависит числа подзон, образующих метастабильное состояние. Показано, что вид резонансных особенностей определяется только сдвигом фаз между прямым и резонансным каналами рассеяния электронов. Основным недостатком предложенной схемы вычисления проводимости является то, что при расчетах использованы сечения рассеяния для двумерных и трехмерных систем, а вероятности туннельных переходов - для одномерных структур.

Авторы [127] исследовали резонансное туннелирование через квантовую точку с одним вырожденным уровнем энергии при наличии сильных кулоновских корреляций и взаимодействия с бозонным окружением при низких температурах. В качестве бозонного окружения могут выступать фононы [141] или флуктуации электромагнитного окружения [142]. Рассмотрен случай симметричного туннельного контакта с сильным кулоновским взаимодействием, когда на уровне энергии квантовой точки либо нет электронов, либо находится только один электрон. Показано, что в неравновесных системах вклад в туннельную проводимость дают как мнимая, так и действительная части проводимости. При этом действительная часть логарифмически зависит от энергии, температуры, напряжения и частоты бозонных мод окружения.

В работе [125] проведены вычисления электронной плотности состояний в окрестности магнитных примесных атомов. Авторы пренебрегли процессами прямого туннелирования на уровне глубоких d и f орбиталей ионов Ce и Co и учли кулоновские корреляции только между электронами, локализованными на разных уровнях. Для расчетов исходных параметров модели было использовано локальное приближение спиновой плотности, которое позволило самосогласованным образом вычислить электронную структуру примесного атома Co. Авторы показали, что в режиме Кондо для магнитной примеси происходит формирование Фано формы линии в плотности состояний, измеряемой методом СТМ/СТС даже в случае, когда рассматривается только туннелирование в состояния непрерывного спектра. Таким образом, авторы объясняют формирование измеренных в работах [101, 131, 132] Фано резонансов тем, что в процессе туннелирования участвуют только электроны проводимости. Фано форма линии возникает независимо от того является ли уровень энергии одночастичным или многочастичным.

Один из наиболее значимых результатов по исследованию Фано-Кондо эффекта был получен в работе [143]. Методом диаграммной техники Келдыша авторы исследовали туннельный электронный транспорт через одноуровневую квантовую точку, расположенную между берегами туннельного контакта. В этой работе получена точная формула для расчета линейной проводимости при нулевой температуре с использованием правила сумм Фриделя и метода ренорм группы для системы с двумя каналами [1, 123]. Авторы [143] показали, что Фано форма линии в режиме

Кондо отличается от формы линии, полученной в системе без межчастичного взаимодействия, и продемонстрировали, что эффект Фано подавляет Кондо пик. Туннельная проводимость вычислена для случая, когда острие зонда СТМ расположено над примесным атомом, а анализ пространственного распределения локальной туннельной проводимости отсутствует.

Таким образом, в работах, посвященных исследованию Фано резонансов, возникающих в локальной туннельной проводимости в окрестности зарядовых локализованных состояний, обычно исследуют системы с бесконечной величиной кулоновского взаимодействия. При изучении систем с конечной величиной кулоновского взаимодействия острие зонда СТМ принимается расположенным над примесным атомом, то есть отсутствует анализ особенностей формы линии Фано резонансов при изменении расстояния от локализованного состояния.

§ 1.4. Роль кулоновских корреляций при туннелировании через связанные квантовые точки

Исследование туннельных характеристик взаимодействующих локализованных состояний с кулоновскими корреляциями является одним из наиболее перспективных направлений в современной физике наноструктур. Туннельный ток и кулоновские корреляции значительно изменяют числа заполнения энергетических уровней локализованных состояний. Неравновесные кулоновские корреляции могут коренным образом модифицировать локальное распределение заряда в окрестности примесных комплексов в туннельных контактах сверхмалых размеров. Кроме того, в зависимости от параметров туннельного контакта можно варьировать пространственное распределение заряда в окрестности примесных состояний и получать области напряжения с отрицательной туннельной проводимостью. Для анализа неравновесных эффектов и спектров туннельного тока в системе двух слабо связанных квантовых точек при наличии кулоновского взаимодействия успешно применялось самосогласованное приближение, основанное на диаграммной технике Келдыша [67]. В работе [144] исследована зависимость чисел заполнения от напряжения на туннельном контакте в приближении среднего поля для режима переменной валентности. Электронный транспорт через одиночную примесь в режиме кулоновской блокады и в режиме Кондо широко исследован в работах [145–150].

Авторы [145] исследовали нелинейный туннельный ток через слабо связанную с берегами туннельного контакта одиночную квантовую точку с кулоновским взаимодействием в режиме Кондо при наличии как постоянного, так и переменного электрических полей. Такая модель открывает возможности для исследования физики неравновесного нестационарного эффекта Кондо. Основной целью работы [145] было исследование отклика квантовой точки на сильное зависящее от времени внешнее электрическое поле. Авторы использовали модифицированную неравновесную теорию возмущений по степеням величины связи квантовой точки с берегами туннельного контакта, основанную на применении формализма неравновесных функций Грина совместно с псевдочастичным подходом и ограничением на пространство возможных физических состояний. Применяя для описания квантовой точки модель Андерсона, зависящую от времени, авторы смогли описать электронный транспорт при напряжениях и частотах внешнего поля меньших, чем расстояние между уровнями энергии точки.

Обнаружено, что эффект Кондо сильно влияет на первую гармонику переменного туннельного тока. При этом высшие гармоники имеют малые амплитуды по сравнению с амплитудой первой гармоники. Выявлено подавление переменным внешним полем аномального пика на нулевой частоте в постоянной составляющей туннельной проводимости системы, что приводит к возникновению пика на нулевой частоте в переменной составляющей туннельной проводимости.

Авторы [146] исследовали мезоскопическую промежуточную систему, помещенную между берегами туннельного контакта и находящуюся под воздействием внешних зависящих от времени напряжений, методом диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов. Получено выражение для полного нелинейного, зависящего от времени туннельного тока через исследуемую систему. Рассмотрен случай, когда учтено взаимодействие в промежуточной системе и не учтено взаимодействие с берегами контакта. Исследовано только резонансное туннелирование, так как этот эффект может быть применен для конструирования высокочастотных усилителей и детекторов. Предложенная модель анализа туннельных характеристик справедлива в достаточно узком диапазоне частот в окрестности десятых долей терагерц. В работе [146] получено общее выражение для зависящего от времени туннельного тока через мезоскопическую систему, которое, по мнению авторов, позволит по новому исследовать когерентный

квантовый транспорт в системах сверхмалых размеров.

Авторы [147] также исследовали особенности электронного транспорта в симметричном туннельном контакте через слабо связанную с берегами двухуровневую квантовую точку с помощью модели Андерсона. Рассмотрены температуры выше температуры Кондо, для анализа плотности состояний использована техника уравнений движения, которые учитывают парные корреляции локализованных электронов и не учитывают корреляции с состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Особенности в туннельной проводимости авторы [147] связывают с присутствием в системе двух различных масштабов энергии: величины кулоновского взаимодействия локализованных электронов и типичного расстояния между уровнями энергии квантовой точки. При этом величина кулоновского взаимодействия является наибольшим параметром в системе, а расстояние между уровнями энергии - наименьшим. Показано, что ширина одночастичных резонансов в туннельной проводимости прямо пропорциональна, а высота - обратно пропорциональна температуре. Наличие температурной зависимости объясняется одновременным транспортом через уровни энергии квантовой точки. Связь уровней энергии с берегами туннельного контакта увеличивается с ростом энергии при уменьшении потенциального барьера.

В работе [148] предложена модель одномерной мезоскопической системы, которая позволила исследовать транспортные особенности, связанные с туннелированием электронно-дырочных пар в одномерных металлических слоях с емкостной связью. Показано, что при малых напряжениях необходимо учитывать экситонные корреляции для корректного описания процессов транспорта заряда. Для малых значений напряжения и электронный и экситонный транспорт оказываются полностью подавленными. С ростом величины напряжения в системе возникает экситонный транспорт. Дальнейшее увеличение напряжения приводит к образованию таких зарядовых состояний за счет транспорта экситонов, при которых становится возможным электронный транспорт через исследуемую систему. При высоких напряжениях в системе существует только электронный транспорт.

В работе [149] подробно исследованы процессы туннелирования через связанные квантовые точки в режиме кулоновской блокады. Авторы показали, что проводимость в такой системе имеет вид осцилляций, опре-

деляемых напряжением на затворе. Характерная величина периода осцилляций изменяется с изменением температуры. В работе сделан вывод о том, что электронные транспортные свойства мезоскопических квантовых нитей в окрестности перехода между металлическим состоянием и изолятором определяются особенностями режима кулоновской блокады. В отличие от системы, состоящей из одной квантовой точки, в связанных квантовых точках с ростом температуры не происходит значительного смещения пиков в туннельной проводимости.

Авторы [150] применили метод ренорм группы для исследования особенностей туннельных процессов в асимметричной двойной квантовой точке, связанной с состояниями непрерывного спектра в берегах контакта. Показано, что конкуренция между сильной и слабой связью промежуточной туннельной системы с состояниями непрерывного спектра в берегах контакта может приводить к инверсной спиновой заселенности триплетного состояния по сравнению с синглетным состоянием.

В настоящее время практически отсутствуют работы, в которых проанализирован электронный транспорт через сильно связанные локализованные состояния. Существует несколько экспериментальных реализаций сильно связанных локализованных состояний, когда кулоновские корреляции имеют величину сопоставимую или даже превышающую расстояние между уровнями энергии промежуточной туннельной системы. Такая ситуация может быть реализована экспериментально, когда несколько примесных атомов или дефектов поверхности расположены в соседних узлах решетки, так что связь между электронными состояниями примесей значительно превосходит связь каждого из локализованных состояний с состояниями непрерывного спектра. Другой возможной экспериментальной реализацией являются две взаимодействующие квантовые точки, слабо связанные с состояниями непрерывного спектра подложки. Специфическое поведение таких систем, которые могут быть описаны моделью нескольких электронных уровней с кулоновским взаимодействием между локализованными электронами, приводит к появлению аномальных пиков в туннельной проводимости и к их расщеплению с ростом величины взаимодействия между точками. Возникновение пиков вызвано конкуренцией двух эффектов: кулоновскими корреляциями локализованных электронов и резонансным электронным транспортом через локализованные состояния [151]. В работе [151] продемонстрировано образование нерегулярных пи-

ков в туннельной проводимости, возникающих при туннелировании через локализованные состояния. Образование пиков является следствием наличия сильного кулоновского взаимодействия и существования резонансного канала туннелирования через локализованные состояния. Особенностью таких систем является расщепление пиков с ростом величины взаимодействия между локализованными состояниями кластера.

Необходимо отдельно упомянуть системы одиночных квантовых точек с несколькими электронными уровнями энергии. Такие системы можно описать моделью, включающей несколько электронных уровней энергии с учетом кулоновских корреляций между локализованными электронами [152–154]. В работе [154] авторы показали, что в двухуровневой системе с кулоновскими корреляциями может возникать отрицательная дифференциальная проводимость. Электроны представлены как бесспиновые частицы, а кулоновское взаимодействие имеет бесконечно большую величину. Поэтому в [154] не учтены возникающие в системе нетривиальные парные корреляторы.

Электронную структуру связанных комплексов можно изменять при помощи внешнего воздействия электрическим полем, которое модифицирует положение одноэлектронных уровней энергии, или с помощью кулоновских корреляций локализованных электронов. В системах с сильной туннельной связью между локализованными состояниями можно ожидать, что туннельный ток будет приводить к неравновесному пространственному распределению локального заряда, что дает возможность манипулирования локальной плотностью заряда за счет сильных электронных кулоновских корреляций. В некотором смысле этот эффект аналогичен эффекту ко-туннелирования, который наблюдался в работах [155, 156]. Кроме того, можно ожидать, что кулоновские корреляции приводят к инверсной заселенности уровней энергии. Эти эффекты проявляются в случае, когда одноэлектронные уровни энергии имеют разную пространственную симметрию.

Для того, чтобы понять природу зарядовых переключений в низкоразмерных структурах были проанализированы уравнения Гейзенберга для электронных чисел заполнения локализованных состояний, учитывавшие только парные корреляции [152, 157].

Немонотонное заполнение уровней энергии в зависимости от напряжения на туннельном контакте, обусловленное процессами туннелирования

в присутствии кулоновских корреляций в системе связанных одноуровневых квантовых точек с бесспиновыми электронами, проанализировано в работе [158]. Однако, авторы учитывали только корреляции первого порядка и использовали приближение, в котором самым большим энергетическим параметром в системе является величина кулоновского взаимодействия. Основное внимание было уделено зависимости чисел заполнения квантовых точек от температуры.

Немонотонное заполнение уровней энергии также было обнаружено при туннелировании через квантовые точки в случае замены берегов туннельного контакта одиночными уровнями энергии [159, 160]. В работе [159] для моделирования квантовой точки использована решеточная модель, которая дает возможность исследовать точку произвольной геометрии и выявить влияние беспорядка в системе на особенности электронного транспорта [161]. Для анализа немонотонного заполнения авторы [159] использовали метод функций Грина. В работе [160] предложен метод анализа влияния электронных корреляций на локальную орбитальную электронную структуру, основанный на использовании обобщенного хаббардовского гамильтониана совместно с формализмом функционала плотности и приближением динамического среднего поля [162–164]. В работе [160] рассмотрены два предельных случая величины кулоновского взаимодействия: кулоновское взаимодействие является самым маленьким $U \rightarrow 0$ и самым большим $U \rightarrow \infty$ параметром в системе.

Туннельные процессы в системах связанных квантовых точек в присутствии сильных кулоновских корреляций являются в настоящее время одной из наиболее актуальных проблем в физике структур сверхмалых размеров. Современный технологический уровень позволяет создавать одиночные квантовые точки с заданным набором параметров и связанные квантовые точки с различной пространственной геометрией [165–169]. Энергетический спектр квантовых точек определяется их формой и размером [170], а, следовательно, может быть задан на этапе роста. Хорошо известная вертикальная геометрия [165–167] позволяет исследовать нестационарные эффекты при формировании различных зарядовых и спиновых конфигураций в квантовых точках как экспериментально [167], так и теоретически [171].

В работе [167] обнаружено оптическое усиление рамановских переходов между синглетными и триплетными состояниями в связанных кван-

товых точках. Предложенная схема усиления является перспективной для создания контролируемого твердотельного импульсного лазера. Преимуществом лазера на связанных квантовых точках является возможность создания полностью когерентной накачки. Уменьшение населенности активных уровней можно контролировать, изменяя напряжение на контакте или толщину туннельного барьера.

Авторы [171] исследовали физические особенности системы двух связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями только в одной из точек с нечетным числом электронов, взаимодействующих с берегами туннельного контакта, с точки зрения симметрии рассматриваемой системы. В работе проанализировано перераспределение заряда между различными спиновыми конфигурациями системы связанных квантовых точек в режиме Кондо. Рассмотрен случай, когда расстройка между уровнями энергии точек превосходит величину связи между точками и величину кулоновского взаимодействия. Предложен новый механизм, который приводит к переходу системы из синглетного состояния в случае слабой связи в триплетное состояние в режиме сильной связи. Авторы показали, что взаимодействие с состояниями непрерывного спектра при нулевом напряжении изменяет энергетический спектр синглетного и триплетного состояний. Изменение энергетического спектра приводит к ситуации, когда энергия триплетного состояния оказывается ниже энергии синглетного состояния. Кроме того, в работе [171] продемонстрировано, что если основным состоянием системы является триплетное состояние, то можно наблюдать эффект Кондо. В случае синглетного основного состояния эффект Кондо в системе двух связанных квантовых точек невозможен.

Латеральная геометрия квантовых точек является более трудно реализуемой экспериментально [168]. Поэтому большинство работ по исследованию связанных латеральных квантовых точек носит теоретический характер [172, 173]. В работе [172] для исследований применен метод псевдопотенциала [174]. Основным вопросом, рассмотренным в работе [172], является вопрос о существовании экситонов и трионных комплексов в латеральных связанных квантовых точках в присутствии внешнего электрического поля. Электрон-дырочные пары в связанных латеральных квантовых точках при наличии планарного электрического поля исследованы в работе [173] на основе приближения, учитывающего корреляции электронов и дырок. Рассмотрены квантовые точки кубической и сферической формы.

Показано, что туннельная связь между точками приводит к значительному искажению экситонного спектра системы.

Основные усилия при исследовании физических процессов в квантовых точках направлены на изучение неравновесных зарядовых состояний и различных спиновых конфигураций, возникающих в результате туннелирования через связанные квантовые точки, при наличии сильного кулоновского взаимодействия [145, 150, 171, 175–177]. Одной из наиболее изученных проблем в этой области является проблема туннелирования через одиночные [178–180] и связанные [23, 145, 150, 171, 175, 181, 182] квантовые точки в режиме Кондо, который позволяет исследовать особенности электронного транспорта в системе при малых напряжениях на туннельном контакте. Для теоретических исследований электронного транспорта в квантовых точках в режиме Кондо обычно применяют диаграммную технику Келдыша для неравновесных процессов [145, 179], метод ренорм группы [150], приближение среднего поля [182] или псевдочастичный подход, предложенный Колеманом [175, 179, 183, 184]. Псевдочастичный подход, предложенный и развитый в работах [183–186], удобно применять для описания свойств сильно коррелированных электронных систем, когда использование обычной диаграммной техники, в которой в качестве нулевого приближения берется пропагатор невзаимодействующих частиц, наталкивается на значительные трудности. Это вызвано необходимостью учета диаграмм всех порядков теории возмущений по взаимодействию при сильном взаимодействии между частицами. Одним из возможных подходов является выделение наиболее существенной части межэлектронного взаимодействия, что делает возможным описание оставшейся части взаимодействия в рамках теории возмущений. В качестве способа выделения основной части взаимодействия можно вводить дополнительные ограничения на возможные состояния и конфигурации частиц. При этом из теории исчезает большой масштаб энергии.

Один из наиболее интересных результатов был получен для системы двух связанных квантовых точек с кулоновским взаимодействием в каждой из точек [175]. Авторы показали, что кулоновские корреляции могут приводить к бистабильному поведению проводимости в режиме Кондо при нулевых напряжениях.

В работе [23] теоретически исследован низкочастотный шум в системе двух сильно коррелированных квантовых точек в режиме Кондо при на-

личии антиферромагнитного обменного взаимодействия между точками. Неравновесный электронный транспорт исследован с применением теории среднего поля для псевдочастичных операторов. Авторы рассмотрели как равновесный, так и неравновесный случай и показали, что поведение системы зависит от соотношения между амплитудами туннелирования, от температуры Кондо и величины антиферромагнитной константы.

Авторы [181] изучали процессы резонансного туннелирования через систему связанных квантовых точек при наличии сильного кулоновского взаимодействия. Кулоновские корреляции внутри каждой из точек имеют одинаковую величину и значительно превосходят другие энергетические параметры системы. Была рассмотрена система, в которой может существовать только два зарядовых состояния - пустое или однократно заполненное. В каждой из точек может одновременно находиться только по одному электрону. В работе обнаружена множественная структура Кондо пиков.

В работе [182] методом среднего поля для псевдочастиц исследована проблема спинового транспорта в связанных квантовых точках, взаимодействующих с ферромагнитными берегами туннельного контакта. При этом условия применимости метода среднего поля для описания такого рода систем авторами не обсуждаются. Предложенный метод можно применять только в случае высокой степени вырождения по спину. Авторы вычислили проводимость в зависимости от величины связи между точками в режиме Кондо для двух различных магнитных конфигураций берегов туннельного контакта в случае бесконечно большой величины кулоновского взаимодействия внутри квантовых точек, когда невозможно двойное заполнение энергетических уровней. Обнаружено, что различия в плотности состояний обусловлены степенью поляризации в берегах контакта.

Большое внимание к системам двух связанных квантовых точек вызвано привлекательностью таких структур для исследования особенностей спинового транспорта [187–190]. В работе [187] методом общего кинетического уравнения для матрицы плотности исследован электронный транспорт через систему двух связанных квантовых точек в режиме обычного туннелирования и в режиме ко-туннелирования в базисе точных собственных функций и собственных значений системы. Такое приближение можно использовать в случае слабо связанных квантовых точек [191]. Авторы рассмотрели только переходы между незаполненными состояниями

и состояниями с одним или двумя электронами и вычислили парциальные вероятности заполнения для синглетного, триплетного, симметричного и асимметричного состояний в узком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Однако, расчеты, выполненные в работе [187], проведены не для всех возможных пространственных конфигураций уровней энергии квантовых точек относительно уровня Ферми, а только для фиксированных значений амплитуд туннельных переходов между квантовыми точками и берегами туннельного контакта.

Авторы [188] исследовали электронный транспорт в системе двух взаимодействующих квантовых точек слабо связанных со спин-поляризованными берегами туннельного контакта. В рассматриваемой системе могут быть локализованы один, два, три или четыре электрона. Анализ зарядового и спинового транспорта проведен с использованием уравнения Лиувилля для редуцированной матрицы плотности в низшем порядке по амплитуде туннельных переходов. Проанализированы туннельная проводимость и вольт-амперные характеристики в зависимости от поляризации магнитных берегов туннельного контакта и величины напряжения на контакте. Зависимости от положения уровней энергии и величины кулоновского взаимодействия в работе [188] не представлены. Авторы обнаружили появление отрицательной дифференциальной проводимости только для случая неколлинеарно поляризованных берегов контакта.

Экспериментальное наблюдение отрицательной дифференциальной проводимости в связанных квантовых точках проведено в работе [192]. Исследован эффект спиновой блокады и синглет-триплетное расщепление в связанных квантовых точках, каждая из которых может содержать по десять электронов. Авторы наблюдали формирование отрицательной дифференциальной проводимости в зависимости туннельного тока от напряжения между стоком и истоком для различных значений расстройки между одноэлектронными уровнями энергии.

В работе [189] рассмотрен электронный транспорт через систему двух взаимодействующих квантовых точек, находящихся между ферромагнитными берегами туннельного контакта, в режиме ко-туннелирования в режиме кулоновской блокады. Авторы исследовали случай, когда квантовые точки могут содержать только два электрона - по одному в каждой точке. Основным полученным в работе результатом является выражение для расчета величины резонансного туннельного тока между берегами туннель-

ного контакта через промежуточную систему, образованную связанными квантовыми точками. При расчетах дифференциальной проводимости из всех параметров системы изменялась только величина кулоновского взаимодействия локализованных электронов в каждой из квантовых точек.

В работе [190] проанализированы особенности туннельных процессов в связанных квантовых точках, слабо взаимодействующих с ферромагнитными берегами туннельного контакта, в режиме спиновой блокады для различных типов берегов контакта в широком диапазоне туннельных напряжений. Промежуточная система представляет собой одноуровневые, вырожденные по спину квантовые точки с одинаковыми значениями величин кулоновского взаимодействия в каждой из точек. Из-за специфических особенностей ферромагнитных берегов контакта одновременно в системе могут находиться не более двух электронов. Исследована спиновая поляризация двойной квантовой точки в зависимости от приложенного напряжения и показано существование конфигураций системы наиболее пригодных для локализации различных спинов. При анализе использованы следующие приближения: матрица плотности вероятности населенностей имеет диагональный вид, а расстройка между уровнями энергии в точках имеет большую положительную величину. Основное внимание в работе [190] уделено зависимости электронного транспорта от степени поляризации берегов контакта.

Таким образом, в настоящее время особенности туннельного электронного и спинового транспорта через связанные локализованные состояния, образованные индивидуальными примесными атомами или квантовыми точками, остаются мало изученными. Отсутствуют комплексные исследования туннельной проводимости в зависимости от величин амплитуд туннельных переходов, от величины и знака расстройки между уровнями энергии, от положения уровней энергии относительно уровня Ферми, от величины кулоновских корреляций.

Основная масса работ посвящена системам связанных квантовых точек, в которых не может одновременно находиться более двух электронов, а в системах с большим количеством электронов накладываются дополнительные ограничения на состояния в берегах туннельного контакта, которые предполагаются спин-поляризованными или ферромагнитными. Отсутствуют модели, которые можно было бы использовать для описания реалистических систем, в которых величина кулоновских корреляций мо-

жет изменяться в широком диапазоне и быть сопоставимой с расстоянием между уровнями энергий в квантовых точках. Кроме того, основная часть работ описывает туннельные процессы при нулевых температурах.

§ 1.5. Электронные квантовые насосы

Еще одним перспективным направлением применения связанных квантовых точек является создание на их основе спиновых и зарядовых нанонасосов [193–213]. Спиновые насосы можно реализовать в системе с кулоновской блокадой и изменяемым во времени напряжением на затворе при наличии внешнего магнитного поля или в режиме слабой связи между квантовыми точками с кулоновским взаимодействием между локализованными в разных точках электронами при наличии внешнего электромагнитного поля.

Большинство работ по исследованию электронных насосов на основе наноструктур в настоящий момент относятся к адиабатическим электронным насосам. Идея создания такого насоса впервые была предложена Таулесом [199]. В работе [199] рассмотрен электронный ток, который возникает при медленном периодическом изменении потенциала в уравнении Шредингера. Показано, что в бесконечной периодической системе с заполненными зонами существует конечное целое значение величины тока за один период, в то время как в системе конечных размеров величина тока изменяется непрерывным образом. Такое квантование электронного транспорта использовано для классификации запрещенных зон в одномерной системе. В работе предложена идея создания переменного тока при нулевом напряжении на контакте в результате периодического изменения параметров проводника. Если внешние параметры изменяются медленно по сравнению с внутренними параметрами системы, то насос будет адиабатическим, а величина среднего заряда через систему не будет зависеть от закона изменения во времени внешних параметров системы.

Первые экспериментальные исследования одноэлектронного насоса представлены в работе [194]. Авторы создали и исследовали туннельный контакт сверхмалого размера, который действует как турникет для одного электрона. При приложении к контакту переменного туннельного напряжения с высокой частотой f , за один период через контакт туннелирует только один электрон, что приводит к формированию плато в вольт-

амперной характеристике, соответствующего значению тока $I = ef$ (где e — заряд электрона). Особенности электронного транспорта авторы объясняют эффектом кулоновской блокады. Созданное устройство функционирует на частотах не превышающих 30 МГц.

Эксперименты по созданию электронных нанонасосов на основе трех туннельных контактов были выполнены авторами [200]. К двум из трех контактов приложено переменное напряжение с частотой f , смещенное по фазе, что приводит к транспорту одного электрона за цикл через рассматриваемое устройство. Транспорт одного электрона подтверждается формированием плато в вольт-амперной характеристике, соответствующего значению тока $I = \pm ef$. Знак туннельного тока зависит только от значения фазы смещения между напряжениями, приложенными к двум контактам, и не зависит от знака напряжения.

Другая разновидность электронных насосов основана на периодическом изменении потенциальных барьеров, образованных затворами [193]. В таких системах квантованный туннельный ток вызван периодическим изменением заполнения квантовых точек. Авторы не рассматривают насосы, действующие в режиме кулоновской блокады, так как в этом режиме времена туннелирования электронов ограничены несколькими мегагерцами. Предложенное в работе [193] устройство основано на туннелировании электронов через потенциальный барьер, образованный двумя сдвинутыми по фазе синусоидальными сигналами, приложенными непосредственно к металлическим пальцам контакта. Авторам удалось получить рабочую частоту пропускания прибора в 3,4 ГГц. Такая частота в совокупности с величинами туннельного тока в наноамперы позволяет использовать прибор в качестве фундаментального стандарта электронного тока.

В ряде работ предложены варианты электронных насосов, основанных на туннелировании электронов через связанные квантовые точки при воздействии внешнего излучения [201–204]. В таких системах эффект накачки электронов достигается за счет приложения осциллирующего сигнала к затвору или за счет воздействия монохроматического [204] либо импульсного [205] излучения.

В работе [204] с применением диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов вычислена средняя величина нелинейного туннельного тока через две взаимодействующие квантовые точки с кулоновскими корреляциями между точками при одновременном приложении к си-

стеме постоянного и переменного напряжений. В резонансе система ведет себя как эффективный электронный насос из-за осцилляций Раби между точками. Электронный ток через насос принимает максимальное значение, когда величина связи двойной квантовой точки с берегами туннельного контакта принимает значение равное частоте Раби. На вольт-амперных характеристиках системы обнаружены резкие скачки, которые соответствуют расщеплению Раби и величине энергии кулоновского взаимодействия.

Авторы [205] рассматривают электронный насос, основанный на системе двух слабо связанных квантовых точек, взаимодействующих с берегами туннельного контакта. Электрон может туннелировать через промежуточную систему при нулевом напряжении на контакте, когда система подвергается воздействию внешнего электромагнитного излучения, возбуждающего квантовые точки. Возбужденное состояние может распасться за счет передачи заряда между берегами контакта. В зависимости от энергии промежуточной системы, которая контролируется напряжением на затворе, электронный транспорт является некогерентным в режиме последовательного туннелирования или когерентным в режиме ко-туннелирования. Режим ко-туннелирования можно осуществить только в случае, когда учтено кулоновское взаимодействие между электронами, локализованными в разных квантовых точках. Постоянный туннельный ток можно контролировать, изменяя частоту излучения. Авторы показали, что постоянный туннельный ток может протекать в отсутствие постоянного напряжения на контакте, если в системе периодически изменяются со временем амплитуды туннельных барьеров.

В работе [206] показано, что для практической реализации электронного насоса необходимо использовать явление кулоновской блокады. Авторы предложили схему для создания одновременно спинового фильтра и спинового насоса. Исследование системы проведено с использованием метода матрицы плотности. Временная эволюция проанализирована в терминах собственных состояний и собственных функций изолированных квантовых точек. Получено выражение для туннельного тока через две связанные квантовые точки, показано что спиновую поляризацию туннельного тока можно контролировать, варьируя напряжение на туннельном контакте и изменяя амплитуду и частоту переменного внешнего магнитного поля. Было показано, что если промежуточная туннельная система содержит двух-частичные состояния, то туннельный ток через насос может быть полно-

стью поляризованным, даже если берега туннельного контакта не являются спин-поляризованными. Также продемонстрировано, что насос может быть реализован как на синглетных, так и на триплетных состояниях в зависимости от величины приложенной частоты.

Общее приближение, описывающее адиабатические электронные насосы на основе связанных квантовых точек в режиме кулоновской блокады в широком диапазоне температур, предложено в работе [207]. Квантовая точка описывается моделью Андерсона, в которой положение электронного уровня энергии зависит от времени. Периодическое изменение во времени напряжений, приложенных к берегам туннельного контакта, и положения уровня энергии приводит к появлению эффекта электронного насоса. Получено выражение для величины туннельного тока, зависящего от времени, и проанализировано поведение туннельной проводимости в случае симметричного туннельного контакта при условии бесконечно большой величины кулоновского взаимодействия.

Эффект кулоновской блокады был также использован для создания неадиабатических электронных квантовых насосов на основе гибридных структур металл-сверхпроводник [208, 209]. Такие системы в большей степени представляют из себя турникеты, а не насосы, поскольку квантованный ток, который прямо пропорционален частоте затвора, появляется при конечных (ненулевых) значениях приложенного напряжения. В работе [209] исследован одноэлектронный транзистор на основе структуры металл-сверхпроводник. Показано, что такую структуру можно рассматривать как метрологический источник тока. Для достижения нужного уровня туннельного тока необходимо использование нескольких параллельных устройств (турникетов). Применение таких наноустройств в метрологии обусловлено возможностью подавления шумов. Уровень шумов, доступный в системах типа турникет, не удастся достичь в адиабатических насосах из-за наличия такого источника флуктуации, как флуктуации заряда, исходно локализованного в системе.

При низких температурах турникеты можно использовать как стандарты тока в наноструктурах и структурах пониженной размерности [210].

Авторы [211] исследовали адиабатический зарядовый насос на основе трех связанных квантовых точек, взаимодействующих с берегами туннельного контакта, в режиме сильной кулоновской блокады. Для анализа поведения системы использованы уравнения движения для матрицы плотно-

сти. Показано, что медленное изменение во времени величины связи между точками приводит к адиабатическому изменению положений электронных уровней энергии в квантовых точках. Зависящее от времени перераспределение заряда в системе, связанное с изменением уровней энергий, приводит к возникновению нестационарного адиабатического туннельного тока.

В работе [212] исследование нестационарного туннельного транспорта в системе с изменяющимися параметрами проведено с использованием приближения матрицы рассеяния. Авторы смогли обобщить описание особенностей адиабатического электронного транспорта в квантовых насосах на случай высоких частот и больших амплитуд накачки. Основным использованным в работе [212] приближением является дельта-образная форма потенциальных барьеров.

Таким образом, большинство работ, посвященных исследованиям особенностей электронного транспорта в квантовых насосах и турникетах относится к адиабатическому внешнему воздействию. Неадиабатический электронный транспорт был рассмотрен только в гибридных структурах металл-сверхпроводник, а модели, позволяющие осуществлять неадиабатический транспорт в связанных полупроводниковых квантовых точках в литературе не представлены.

§ 1.6. Нестационарные эффекты в наноструктурах. Релаксация заряда в квантовых точках

Сегодня наноэлектроника является динамично развивающейся областью современной физики. Важнейшей задачей в этой области является контролируемое манипулирование локализованным зарядом в системах сверхмалых размеров с целью создания низкоразмерных структур с заданными параметрами электронного транспорта для последующего внедрения в технологическую цепочку по производству базовых элементов твердотельной наноэлектроники [214, 215]. Одиночные квантовые точки, которые называют искусственными атомами [216, 217], и связанные квантовые точки - искусственные молекулы [218, 219], являются перспективными структурами, которые можно использовать для создания устройств сверхмалых размеров в связи с возможностью пространственной локализации электронов на масштабах порядка 10 нм. Кроме того, современные технологии роста квантовых точек позволяют с высокой точностью контролировать такие

параметры системы как размер, форма и энергетический спектр [72].

Кроме потенциального технологического применения, квантовые точки являются идеальными объектами для исследования фундаментальных физических процессов, таких как: многочастичные корреляции, электронный транспорт и нестационарные эффекты. Системы связанных квантовых точек значительно отличаются от одиночных квантовых точек из-за наличия возможности изменять величину туннельной связи между точками [218, 220]. Это является физической причиной образования нелинейности в системе и, следовательно, приводит к существованию таких явлений как бифуркации [221] и бистабильность [222]. Связанные квантовые точки можно использовать для создания электронных устройств, основанных на квантовой кинетике индивидуальных локализованных состояний [204–206, 223]. Применяя связанные квантовые точки можно создавать логические переключатели, используя явление сверхбыстрого переключения между двумя стабильными состояниями. Кроме того, механизм туннелирования между связанными квантовыми точками зависит не только от свойств самих точек, но и от внешних условий, в которых находится исследуемая система [224]. Поэтому особенности электронного и спинового транспорта в связанных квантовых точках с различной пространственной конфигурацией активно исследуются как экспериментально [225, 226], так и теоретически [227, 228].

В работе [225] проведены низкотемпературные туннельные экспериментальные исследования систем из двух и трех связанных квантовых точек с изменяющейся величиной туннельной связи. С возрастанием величины связи пики в туннельной проводимости, соответствующие эффекту кулоновской блокады, расщепляются на два или три пика для случаев системы из двух или трех квантовых точек соответственно. Расщепление позволило экспериментально оценить полную энергию взаимодействия между квантовыми точками. Авторы [226] показали, что процесс одноэлектронного туннелирования через связанные квантовые точки разных размеров определяется величиной электростатического взаимодействия между квантовыми точками. При низких температурах в работе [226] обнаружено, что двойная квантовая точка образует состояние похожее на состояние молекулы.

В работе [227] показано, что туннелирование электронов между двумя квантовыми точками приводит к существованию области параметров

системы (величина туннельных переходов между квантовыми точками, величина связи с состояниями непрерывного спектра и величина кулоновского взаимодействия), в которой можно наблюдать как коллективную кулоновскую блокаду, так и кулоновскую блокаду каждой из квантовых точек и области, в которой кулоновская блокада не возникает.

Авторы [228] исследовали эффект кулоновской блокады при туннелировании через две связанные квантовые точки. Температурная зависимость линейной проводимости определяется величиной туннельной связи точек. В работе показано, что с ростом величины связи между точками должен происходить переход от поведения системы, когда проводимость не является функцией температуры, к поведению, когда происходит степенное подавление проводимости. Эффект уменьшения проводимости объяснен перераспределением заряда между точками. Аналитически получена форма пиков проводимости, соответствующих кулоновской блокаде, в зависимости от величины напряжения на туннельном контакте.

Экспериментально показано, что на основе связанных квантовых точек можно создавать структуры как сильно связанные с состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта, так и слабо связанные [218].

Использование одиночных и связанных квантовых точек при создании современных устройств нанoeлектроники требует тщательного анализа следующих проблем, неизбежно возникающих в системах сверхмалых размеров и напрямую влияющих на особенности электронного транспорта: неравновесное распределение заряда, процессы релаксации заряда и неравновесные эффекты [229–236].

В работе [229] предложена технология, которая позволяет создавать одиночные квантовые точки на основе кремния с изменяемыми параметрами туннельных барьеров. Авторы исследовали особенности низкотемпературного электронного транспорта в двух разных квантовых точках в режиме большого (порядка 100) и малого (порядка 10) числа туннелирующих электронов. Возможность изменять высоту и ширину туннельных барьеров позволяет проводить исследования фундаментальных свойств кремниевых квантовых точек, таких как эффект Кондо, спиновое и долинное вырождение. Изучение кремниевых квантовых точек, проведенное в работе [229], представляет интерес из-за большого времени электронно-спиновой когерентности, обусловленной малой величиной спин-орбитального взаимодей-

ствия в кремнии.

Авторы [230] анализировали зарядовые эффекты в системе из трех связанных квантовых точек с различными емкостями и величинами туннельной связи с использованием электростатической емкостной модели, учитывающей в первом порядке процессы туннелирования электронов. Предложенная модель является простейшим приближением, описывающим три связанные квантовые точки, которое не учитывает спины электронов и туннельную связь квантовых точек с берегами контакта.

Экспериментальное исследование системы двух связанных квантовых точек на двумерном полуметалле на основе графена, в котором при низких температурах происходит одноэлектронный транспорт, представлено в работе [231]. В предложенной планарной геометрии можно изменять как величину туннельной связи между квантовой точкой и состояниями непрерывного спектра, так и величину связи между двумя точками. Были проведены измерения энергии и емкости исследуемой системы. Показано, что зарядовые состояния связанных квантовых точек можно контролировать с помощью планарных контактов, относящихся к каждой точке в отдельности. Предложенная система на основе графена может иметь применение для создания элементов квантового компьютера на основе квантовых точек [233].

Электронный транспорт в квантовых точках определяется величиной кулоновских корреляций локализованных электронов, амплитудами туннельных переходов в системе и топологией системы, определяющей положение уровней энергии. В некоторых случаях кулоновское взаимодействие в квантовых точках является слабым и им можно пренебречь [237]. Однако, для точек малого размера кулоновское взаимодействие всегда является сильным [238]. Кулоновское взаимодействие может определять особенности системы, зависящие от времени [239]. Авторы [239] теоретически исследовали нелинейный зависящий от времени транспорт электронов через одиночную квантовую точку, находящуюся между берегами туннельного контакта, в режиме одноэлектронного туннелирования. Показано, что в системе за счет электрон-электронного взаимодействия при адиабатической модуляции напряжения на затворе генерируется дополнительный постоянный адиабатический туннельный ток. Ток возникает только если одновременно выполнены условия для существования двух резонансных одноэлектронных каналов туннелирования. В отсутствии взаимодействия адиа-

батический туннельный ток в точности равен нулю для любых значений напряжений и магнитного поля в системе. Проблема временной эволюции (релаксации) заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов, является в настоящее время важной и до сих пор нерешенной.

Когерентная временная эволюция заряда в полупроводниковой двойной квантовой точке при наличии кулоновского взаимодействия была экспериментально изучена в работе [240]. Авторы изменяли состояние локализованного заряда с помощью сверхбыстрых импульсов напряжения и наблюдали осцилляции туннелирующих электронов. Временную зависимость чисел заполнения удалось аппроксимировать выражением, содержащим два слагаемых. Первое слагаемое соответствует экспоненциальной релаксации заряда с осцилляциями. Второе слагаемое описывает линейную релаксацию заряда.

Теоретический анализ временной эволюции заряда, локализованного в одиночной квантовой точке и связанных точках в отсутствие кулоновского взаимодействия, был проведен в работах [241–243]. Получено выражение для константы релаксации, справедливое как для уровней с большой, так и для уровней с малой энергией. Был сделан вывод о том, что скорость релаксации заряда зависит от начального состояния системы и от способа приготовления зарядового состояния. В результате было показано, что при контроле за формой двух-ямного потенциала можно наблюдать резонансное рассеяние на двух близко лежащих уровнях. Наиболее интересные результаты получены в случае резонансного туннелирования между квантовыми ямами. В этом случае временная характеристика распада начального зарядового состояния оказывается более сложной, чем просто сумма двух экспонент, что связано с возникновением квантовой интерференции. В работах [241–243] были обнаружены только два временных масштаба. Третий временной масштаб не был обнаружен, так как автор не учитывал эффекты перераспределения заряда между квантовыми ямами.

В работе [244] выполнены экспериментальные измерения скорости релаксации локализованного заряда в квантовой яме, взаимодействующей с двумя берегами туннельного контакта. Начальное состояние создавалось с помощью пикосекундного лазерного импульса. Авторы установили три основных механизма, позволяющие заряду релаксировать в равновесное

состояние: излучательный процесс рекомбинации, безызлучательный процесс рекомбинации на структурных дефектах, а также перераспределение заряда. Было обнаружено, что увеличение толщины барьера приводит к уменьшению скорости релаксации локализованной зарядовой плотности.

Авторы [245] теоретически исследовали особенности релаксации заряда в одиночной одноуровневой квантовой точке, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновских корреляций. Были обнаружены три временных масштаба, описывающих релаксацию локализованного зарядового состояния. Система выводилась из состояния равновесия приложением ступенчатого потенциала. Было показано, что релаксация системы определяется двумя масштабами, соответствующими релаксации заряда и спина, и третьим масштабом, который не зависит от положения уровня энергии и от величины кулоновского взаимодействия.

Дальнейший прогресс в современной микро- и наноэлектронике будет зависеть от понимания внутренних механизмов обратимого переключения связанных квантовых точек и органических молекул между состояниями, соответствующим высоким и низким значениям туннельного тока. В настоящее время этот вопрос остается нерешенным. Кроме того, на современном этапе развития микро- и наноэлектроники эффект переключения систем сверхмалых размеров между устойчивыми состояниями не является полностью контролируемым. Поэтому важным является вопрос об исследовании бистабильностей и бифуркаций в связанных квантовых точках. В качестве методов контроля сверхбыстрых переключений можно использовать такие параметры системы как изменение положения уровней энергии, значений туннельной связи или варьирование величины кулоновского взаимодействия локализованных электронов.

Явление бистабильности, которое проявляется на вольт-амперных характеристиках при протекании туннельного тока через связанные квантовые точки, широко исследуется экспериментально и теоретически в связи с возможностью использования при создании сверхбыстрых переключателей, применяемых в осцилляторах и усилителях [175, 246–248]. Экспериментально продемонстрировано, что переключение системы между несколькими состояниями определяется выбором контактов и материала подложки и может наблюдаться даже в случае самых простых молекул, адсорбированных на поверхности [214, 215]. В качестве причины, которая вызывает переход системы между двумя стабильными состояниями, ча-

сто рассматривают кулоновские корреляции локализованных электронов. Роль кулоновских корреляций в формировании бистабильности в системе связанных квантовых точек экспериментально исследована в работе [222]. Обнаружено, что двухбарьерные структуры, в которых возможно резонансное туннелирование, проявляют внутреннюю бистабильность на вольт-амперных характеристиках из-за нелинейности, связанной с кулоновскими корреляциями. Вольт-амперные характеристики отчетливо демонстрируют две ветви, соответствующие большему и меньшему значениям туннельного тока при одном и том же значении напряжения на туннельном контакте.

Для теоретического исследования бистабильного поведения в туннельных наноструктурах обычно применяют метод псевдочастичных операторов [175], диффузионное приближение [247] или модель Хаббарда с отрицательными значениями величин кулоновского взаимодействия [246].

Планарными квантовыми точками можно управлять, изменяя напряжение на затворе [217]. Эта особенность дает возможность локализовать электрон [249] или экситон [250] в системе из нескольких связанных квантовых точек и манипулировать зарядовыми состояниями. Такая особенность планарных квантовых точек позволяет считать их идеальными объектами для создания эффективных зарядовых ловушек. Предыдущие исследования, выполненные с использованием метода СТМ/СТС, продемонстрировали долгоживущие зарядовые ловушки в одиночных квантовых точках [251]. Авторы впервые выполнили экспериментальные измерения энергии зарядового состояния, находящегося в ловушке, и определили время нахождения состояния в ловушке, которое составило 250 мс.

В работе [252] исследовано пленение электрона в системе из двух связанных квантовых точек. Была измерена температура захваченного электрона и определена энергия связи. Исследование квантовой точки квадратной формы, содержащей несколько электронов, при наличии примесного потенциала притяжения было проведено авторами [253]. Показано, что наличие примеси приводит к значительному изменению зарядовой плотности и энергии возбужденных состояний двух-электронной квантовой точки. Эффект от кулоновских корреляций проявился в увеличении энергии локализованного в точке заряда.

Необходимо отметить, что электронный транспорт в квантовых точках определяется не только кулоновскими корреляциями локализованных электронов, но и электрон-фононным взаимодействием [254–256]. Время

жизни возбужденного состояния в квантовых точках GaAs составляет несколько наносекунд, эта величина во многом определяется рассеянием на акустических фононах. Рассеяние на фононах является доминирующим механизмом в одиночных и вертикальных квантовых точках [257]. Для понимания нестационарных эффектов в квантовых точках необходимо учитывать влияние электрон-фононного взаимодействия на временную эволюцию локализованного заряда, поскольку электрон-фононное взаимодействие приводит к появлению дополнительных неупругих каналов туннелирования и, тем самым, вызывает появление новых особенностей в электронном транспорте [258–262].

В работе [254] показано, что учет электрон-фононного взаимодействия приводит к сдвигу невозмущенных уровней энергии в квантовых точках. Авторы предлагают простую модель для описания электрон-фононного взаимодействия, позволившую провести оценку величины взаимодействия. Исследование электронного транспорта в неравновесной системе, состоящей из связанных квантовых точек, взаимодействующих с берегами туннельного контакта и фононным окружением (термостатом), методом ренорм группы проведено в работе [255]. Получено выражение для стационарного туннельного тока в случае достаточно сильной величины туннельной связи между квантовыми точками, берегами туннельного контакта и фононными модами. Туннелирование через связанные квантовые точки происходит в режиме кулоновской блокады. Показано, что вклад в ток дают два канала туннелирования - упругий и неупругий.

Основная часть теоретических работ по исследованию проблемы электронного транспорта в системах связанных квантовых точек при наличии электрон-фононного взаимодействия посвящена анализу туннельного тока и токовых корреляций (низкочастотный шум) [24, 256]. В работе [256] методом диаграммной техники для неравновесных процессов показано, что в присутствии электрон-фононного взаимодействия в дифференциальной проводимости одноуровневой квантовой точки кроме резонансного пика, соответствующего уровню энергии в квантовой точке, появляются дополнительные пики с характерным расстоянием между ними, соответствующим величине фононной частоты.

Авторы [24] теоретически исследовали влияние неупругого рассеяния электронов на особенности, возникающие в туннельном токе и в токовых корреляциях, при туннелировании через мезоскопическую квантовую

точку, связанную с берегами туннельного контакта. В процессе анализа задача о многочастичном электрон-фононном взаимодействии была сведена к задаче о многоканальном одноэлектронном рассеянии. Аналогично полученным в работе [256] результатам показано, что электрон-фононное взаимодействие приводит к формированию дополнительных пиков в дифференциальной проводимости системы и в спектральной плотности шума. В обеих работах [24, 256] показано, что при туннелировании в резонансном режиме в отсутствие фононов в зависимости низкочастотного шума от напряжения существует два пика, а при туннелировании с участием фононов появляется только один пик.

В нескольких работах были сделаны попытки проанализировать релаксацию заряда в присутствии электрон-фононного взаимодействия в системе [263–266]. Показано [263], что планарное ограничение влияет на скорость релаксации одноэлектронных состояний в параболической квантовой точке. Автор рассмотрел деформирующий потенциал, возникающий при взаимодействии между электронами и акустическими фононами. В работе [263] не учитываются пьезоэлектрические эффекты из-за их слабой роли в двумерных структурах.

В работе [265] численно и аналитически исследована релаксация заряда в связанных квантовых точках при наличии взаимодействия электронов как с оптическими, так и с акустическими фононами. Основными параметрами, влияющими на динамику заряда в системе, являются расстояние между уровнями энергии в квантовых точках и пространственная конфигурация системы. Основное внимание в [265] уделено исследованию релаксации заряда с испусканием одиночного акустического фонона.

Авторы работы [266] получили результаты, которые противоречат предположениям, сделанным в [263]. Показано, что для правильного анализа релаксации зарядового состояния в квантовых точках при наличии электрон-фононного взаимодействия необходимо учитывать пьезоэлектрические эффекты, которые при определенных условиях являются доминирующими в системах сверхмалых размеров. Авторы показали возможность создания квантовых приборов сверхмалых размеров с характерными временами жизни в несколько микросекунд не только на основе связанных квантовых точек [267], но и на основе одиночных точек.

Таким образом, при исследовании релаксации заряда в связанных квантовых точках были обнаружены только два характерных масштаба,

определяющих временную эволюцию заряда. Три временных масштаба были найдены только при описании электронного транспорта в одной квантовой точке с кулоновским взаимодействием. Анализ нелинейных свойств вольт-амперных характеристик связанных квантовых точек выявил только эффект бистабильности, а работ, в которых было бы исследовано возникновение бифуркаций при наличии кулоновского взаимодействия не существует. Эффект пленения заряда был обнаружен и исследован только в наиболее простых системах, состоящих из одной или двух квантовых точек. Мало исследовано влияние электрон-фононного взаимодействия на временную эволюцию заряда в квантовых точках. Основная часть выполненных исследований относится к вопросу об особенностях, возникающих в дифференциальной проводимости системы квантовых точек, при наличии электрон-фононного взаимодействия.

Работы, посвященные анализу особенностей нестационарного электронного транспорта в системах связанных квантовых точек, не учитывают корреляции локализованных электронов с электронами проводимости в берегах туннельного контакта.

§ 1.7. Выводы

Резюмируя результаты представленных в литературе исследований неравновесных эффектов и особенностей нестационарного электронного транспорта в наноструктурах можно отметить следующее.

1. Основная часть теоретических работ по исследованию низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, возникающего в туннельном контакте, выполнена для модельных мезоскопических систем со специальным образом подобранной геометрией. Спектральная плотность туннельного тока обычно исследуется на нулевой частоте и в узком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Только в отдельных работах проведены исследования спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне частот при отличных от нуля значениях напряжения смещения на туннельном контакте.

Отсутствуют исследования, направленные на изучение роли зарядовых локализованных состояний в формировании низкочастотной составляющей спектров туннельного тока при наличии кулоновских

корреляций.

2. Недостаточно изучены эффекты, связанные с влиянием примесных атомов и дефектов поверхности на локальную плотность состояний. При расчетах локальной плотности состояний обычно пренебрегают изменением плотности состояний непрерывного спектра, вызванным взаимодействием электронов проводимости непрерывного спектра с примесными атомами.
3. При исследовании Фано резонансов в локальной туннельной проводимости обычно рассматривают системы с бесконечной величиной кулоновского взаимодействия, либо исследуют системы с конечной величиной кулоновского взаимодействия в случае, когда острие зонда СТМ расположено над примесным атомом.
4. Недостаточно изучены особенности туннельного электронного и спинового транспорта через связанные локализованные состояния, образованные индивидуальными примесными атомами или квантовыми точками. В представленных работах широко исследованы зависимости туннельной проводимости или вольт-амперные характеристики при изменении в узком диапазоне только одного или нескольких параметров системы.

Отсутствуют работы, в которых проведено комплексное исследование туннельной проводимости в зависимости от величин амплитуд туннельных переходов, от величины и знака расстройки между уровнями энергии, от положения уровней энергии относительно уровня Ферми, от величины кулоновских корреляций.

5. Основная масса исследований посвящена системам связанных квантовых точек, в которых не может одновременно находиться более двух электронов. В системах с большим количеством электронов накладываются дополнительные ограничения на состояния в берегах туннельного контакта, которые предполагаются спинполяризованными или ферромагнитными. Даже с такими специфическими ограничениями очень редко удается получить области с отрицательной туннельной проводимостью для выделенного набора параметров системы.

6. Отсутствуют модели, которые можно было бы использовать для описания реальных систем. То есть модели, где величину кулоновского взаимодействия можно изменять в широком диапазоне, чтобы она была сопоставима с расстоянием между уровнями энергий в квантовых точках.
7. Основная часть работ, посвященных исследованию электронного транспорта в системах связанных квантовых точек в режиме квантового насоса, описывает адиабатические насосы на основе двух или трех связанных квантовых точек или относится к системам, называемым турникетами. В качестве причин транспорта электронов в таких системах обычно рассматривают эффект кулоновской блокады и/или периодическое изменение во времени внешних параметров системы: напряжения на контакте, положения уровней энергии, модуляцию ширины и высоты туннельных барьеров.
8. Неадиабатический электронный транспорт был исследован только в гибридных структурах металл-сверхпроводник - квантовых турникетах. Не было предложено моделей, позволяющих осуществлять неадиабатический транспорт в связанных полупроводниковых квантовых точках.
9. Небольшое число публикаций посвящено исследованию нестационарных процессов в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновских корреляций и электрон-фононного взаимодействия. При исследовании релаксации заряда в связанных квантовых точках были обнаружены только два характерных масштаба, определяющих временную эволюцию заряда. Три временных масштаба были найдены лишь при описании электронного транспорта в одной квантовой точке с кулоновским взаимодействием.
10. При анализе нелинейных свойств вольт-амперных характеристик связанных квантовых точек был изучен только эффект бистабильности. При этом нет работ, в которых было бы исследовано возникновение бифуркаций. Эффект пленения заряда был обнаружен и исследован только в системах, состоящих из одной или двух квантовых точек. Не

было рассмотрено явление пленения заряда в системах, состоящих из большого числа квантовых точек.

11. Мало исследовано влияние электрон-фононного взаимодействия на временную эволюцию заряда в квантовых точках. Основная часть выполненных исследований исследует вопрос об особенностях, возникающих в дифференциальной проводимости системы квантовых точек, при наличии электрон-фононного взаимодействия. Нет работ, посвященных микроскопическому анализу влияния электрон-фононного взаимодействия на скорость релаксации зарядового состояния.
12. Работы, посвященные анализу особенностей неравновесного нестационарного электронного транспорта в системах связанных квантовых точек, не учитывают корреляции локализованных электронов с электронами проводимости в берегах туннельного контакта.

Таким образом, существующие методы теоретического анализа неравновесных наноструктур с сильными электронными корреляциями не позволяют описать наблюдаемые особенности электронного транспорта в случае, когда величина кулоновского взаимодействия сопоставима с расстоянием между одноэлектронными уровнями энергии локализованных состояний или с ширинами уровней, обусловленными туннельной связью с состояниями непрерывного спектра. Соответственно, возникает проблема развития взаимосвязанных теоретических подходов и методов корректного описания особенностей нестационарного электронного транспорта в неравновесных наноструктурах с сильными электронными корреляциями без введения малого параметра по величине кулоновского взаимодействия. На основании представленных выводов по исследованию неравновесных эффектов и особенностей нестационарного электронного транспорта в наноструктурах при наличии сильного межчастичного взаимодействия сформулированы цель и задачи диссертационной работы.

ГЛАВА 2

Исследование пространственного распределения локальной туннельной проводимости на поверхности полупроводниковых кристаллов в присутствии кулоновских корреляций локализованных электронов

В настоящее время СТМ/СТС является одним из наиболее мощных методов по исследованию влияния локализованных состояний, образованных примесными атомами и дефектами на поверхности, на локальную плотность поверхностных состояний. Правильная интерпретация экспериментальных результатов требует сравнения с теоретическими расчетами, проведенными для модельных систем, что в совокупности позволит использовать туннельные измерения как метод контроля за состояниями единичных примесных атомов и дефектов и имеет принципиальное значение для определения и описания свойств приборов в твердотельной электронике.

Понимание особенностей электронного транспорта через зарядовые локализованные состояния позволит реализовать устройства для передачи, хранения и кодирования информации на базе отдельных примесных атомов [69, 70]. Важным этапом на пути реализации этой задачи является создание наноструктур с затворами на базе единичных примесных атомов, для которых можно модифицировать энергетический спектр за счет взаимодействия с состояниями непрерывного спектра окружения или изменения положения примеси в полупроводниковой матрице. Одной из основных и до сих пор не решенных проблем в этой области является проблема адекватного описания туннельных процессов между уровнями энергии примесных атомов и состояниями непрерывного спектра резервуаров [72].

Обычно при расчетах локальной плотности поверхностных состояний не принимают во внимание изменения локальной плотности состояний непрерывного спектра, вызванные наличием локализованных состояний на исследуемой поверхности. Однако, учет изменения локальной плотности состояний непрерывного спектра приводит к возникновению принципиально новых особенностей в локальной туннельной проводимости [268]. Иссле-

дование пространственной зависимости туннельной проводимости позволит понять фундаментальные причины возникновения типичных особенностей в спектрах туннельного тока, измеренных в окрестности локализованных состояний при наличии кулоновского взаимодействия, характерных для различных типов примесных атомов (мелких и глубоких примесей) [269–272].

§ 2.1. Пространственное распределение электронной плотности состояний вблизи примесных атомов на поверхности полупроводников

Исследуем влияние отдельного примесного атома, расположенного в узле атомной решетки, на локальную плотность поверхностных состояний в полупроводнике [268]. Рассмотрим модель двумерной анизотропной атомной решетки (рис. 2.1), состоящей из атомов одного типа с уровнями энергии ε_1 и примесным атомом в одном из узлов решетки с уровнем энергии ε_d . Амплитуду переходов вдоль атомной цепочки между соседними узлами решетки с атомами одного типа будем полагать одинаковой и равной t . Взаимодействие между атомами соседних цепочек будем описывать амплитудой перехода T , которая имеет одно и то же значение для всех атомов соседних цепочек. Расстояние между атомами вдоль цепочки будем считать равным a , а между атомами соседних цепочек - b . Амплитуда перехода из узла решетки, в котором расположен примесный атом, в ближайшие узлы вдоль атомной цепочки равна τ , а в ближайшие узлы в направлении перпендикулярном атомной цепочке \mathfrak{S} (рис. 2.1).

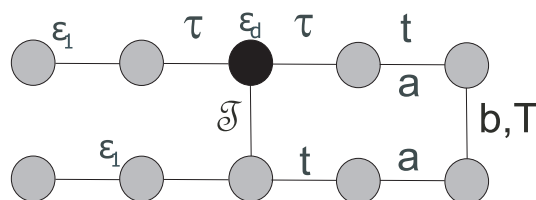


Рис. 2.1. Модель двумерной атомной решетки с примесным атомом в одном из узлов.

Представленная модель может быть описана с помощью гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{tun} \quad (2.1)$$

в котором

$$\hat{H}_0 = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} t c_i^\dagger c_j + \sum_{\langle k,l \rangle} T c_k^\dagger c_l + h.c. \quad (2.2)$$

описывает двумерную атомную решетку без примеси с переходами между соседними узлами. Операторы $c_{k/l}^\dagger/c_{k/l}$ и $c_{i/j}^\dagger/c_{i/j}$ соответствуют рождению/уничтожению электронов в узлах решетки. Индексы i, j относятся к направлению вдоль атомных цепочек, а индексы k, l к направлению перпендикулярному атомным цепочкам.

Туннельный гамильтониан

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{i,d} \tau c_i^\dagger c_d + \sum_{k,d} \mathfrak{S} c_k^\dagger c_d + h.c. \quad (2.3)$$

описывает переходы электронов между примесным атомом и соседними атомами в решетке.

Оператор

$$\hat{H}_{imp} = \sum_d \varepsilon_d c_d^\dagger c_d \quad (2.4)$$

описывает локализованное состояние, образованное примесным атомом в одном из узлов решетки. Операторы c_d^\dagger/c_d соответствуют рождению/уничтожению электронов в локализованном состоянии.

Выражение для локальной плотности состояний, содержащее зависимость от расстояния вдоль атомной цепочки, при наличии примесного атома в одном из ее узлов имеет вид [268]:

$$\rho(\omega, x) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\kappa_x, \kappa_{x1}} G_{\kappa_x, \kappa_{x1}}^R(\omega) e^{i\kappa_x x} e^{-i\kappa_{x1} x} \quad (2.5)$$

где x -расстояние, отсчитываемое от места положения примесного атома вдоль цепочки. Функция Грина $G_{\kappa_x, \kappa_{x1}}^R(\omega)$ описывает изменения состояний непрерывного спектра полупроводника, вызванные присутствием локализованного состояния, образованного примесным атомом, и может быть найдена из системы уравнений Дайсона:

$$\begin{aligned} G_{kk_1}^R(\omega) &= G_{kk}^{0R}(\omega) + G_{kk}^{0R}(\omega) \tau G_{dk_1}^R(\omega) \\ G_{dk_1}^R(\omega) &= G_{dd}^{0R}(\omega) \tau \sum_{k_2} G_{k_2 k_1}^R(\omega) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Введем обозначение для скорости релаксации:

$$\gamma = \tau^2 \sum_k G_{kk}^{0R} \quad (2.7)$$

Тогда в случае однородной одномерной атомной цепочки с примесным атомом для зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра от расстояния $\rho_{vol}(\omega, x)$ получаем выражение:

$$\rho_{vol}(\omega, x) = \rho_0(\omega) \cdot \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2 \cdot (1 - \cos(2k(\omega)x))}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \quad (2.8)$$

Явный вид зависимости $k(\omega)$ может быть найден из закона дисперсии для атомной цепочки:

$$\varepsilon_k = 2t \cos(ka) \quad (2.9)$$

Для расчета локальной плотности поверхностных состояний помимо вклада от локальной плотности состояний непрерывного спектра, необходимо учесть также вклад в плотность состояний от примесного атома $\rho_{imp}(\omega)$. Плотность состояний на примесном атоме имеет лоренцеву форму и может быть вычислена с использованием выражения:

$$\begin{aligned} \rho_{imp}(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \cdot \text{Im} \sum_d G_{dd}^R(\omega) = \\ &= -\frac{1}{\pi} \cdot \text{Im} \sum_d \frac{1}{\omega - \varepsilon_d + i\gamma} = \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Тогда выражение для локальной плотности поверхностных состояний является результатом суммирования локальной плотности состояний непрерывного спектра и плотности состояний на примесном атоме:

$$\rho(\omega, x) = \rho_{vol}(\omega, x) + \rho_{imp}(\omega) \quad (2.11)$$

Зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра и локальной плотности поверхностных состояний от энергии, рассчитанные над примесным атомом ($x=0$), при различных значениях параметров представлены на рис. **2.2**.

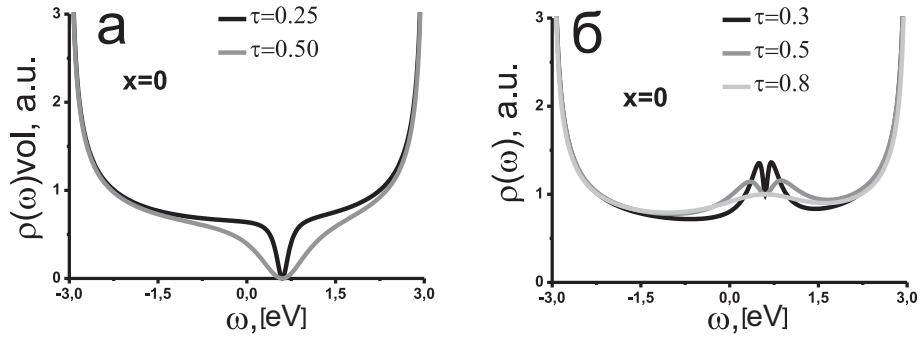


Рис. 2.2. Зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра (а) и локальной плотности поверхностных состояний (б) от энергии для одномерной цепочки с примесным атомом в одном из узлов, рассчитанные над примесным атомом ($x=0$). $a = 1$, $t = 1, 5$, $\varepsilon_d = 0, 6$.

Полученные зависимости демонстрируют, что наличие примесного атома в одном из узлов атомной цепочки приводит к формированию провала в локальной плотности состояний непрерывного спектра, рассчитанной над примесным атомом, при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома (рис. 2.2а). Ширина провала определяется параметрами исследуемой системы: скоростью релаксации и соотношением значений амплитуды туннелирования между примесным атомом и соседними узлами цепочки и амплитуды туннелирования между узлами цепочки, содержащими атомы одного типа. Рост амплитуды туннелирования между примесным атомом и соседними узлами цепочки приводит к уширению резонансного провала. Эффект возникновения провала в локальной плотности состояний непрерывного спектра был обнаружен методом СТМ/СТС в работе [273].

Локальная плотность поверхностных состояний, рассчитанная над примесным атомом, имеет вид пика лоренцевой формы с провалом малой амплитуды при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома (рис. 2.2б). С ростом амплитуды туннелирования между примесным атомом и соседними узлами цепочки глубина резонансного провала уменьшается и происходит уширение лоренцева пика.

Рассмотрим зависимости локальной плотности поверхностных состояний и локальной плотности состояний непрерывного спектра при фиксированном наборе величин параметров системы для различных значений расстояния от примесного атома (x), выраженных в периодах вдоль атомной цепочки a (рис. 2.3).

Рассмотрим сначала локальную плотность состояний непрерывного спектра (кривые черного цвета на рис. 2.3). С ростом расстояния от

примесного атома ($x \neq 0$) в зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра формируется набор провалов. Амплитуды провалов в локальной плотности состояний уменьшаются при приближении к краям разрешенной зоны (рис. **2.3б,г**). Значения амплитуд и ширин провалов в плотности состояний, как и в случае расчетов, проведенных над примесным атомом, зависят от параметров системы. Положение провалов на шкале энергий можно определить из соотношения:

$$2\pi n = 2k(\omega)r \quad (2.12)$$

где, n -целое число. Выполнение равенства означает обращение в ноль числителя в выражении для локальной плотности состояний непрерывного спектра (выражение 2.8). Для конечного значения расстояния от примесного атома вдоль цепочки, отличного от нуля, при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$), в локальной плотности состояний непрерывного спектра может возникать не провал, а пик (рис. **2.3а,в**). При фиксированном наборе параметров системы наличие пика или провала определяется значением расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки.

Исследуем локальную плотность поверхностных состояний, которая может быть явным образом измерена методом СТМ/СТС (кривые серого цвета на рис. **2.3**). Сравнение зависимостей локальной плотности поверхностных состояний и локальной плотности состояний непрерывного спектра, приведенных на рис. **2.3**, показывает, что для фиксированного значения расстояния учет плотности состояний примесного атома может приводить к значительному изменению вида зависимости локальной плотности поверхностных состояний по сравнению с видом локальной плотности состояний непрерывного спектра. Провал в зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра может смениться пиком в локальной плотности поверхностных состояний (рис. **2.3б**).

Параметром, определяющим вид локальной плотности поверхностных состояний, является амплитуда перехода между примесным атомом и атомами в соседних узлах цепочки. Наибольшие изменения соответствуют случаю, когда значение амплитуды переходов между атомами одного типа в цепочке значительно превосходит значение амплитуды переходов между примесным атомом и соседними узлами цепочки. С увеличением значе-

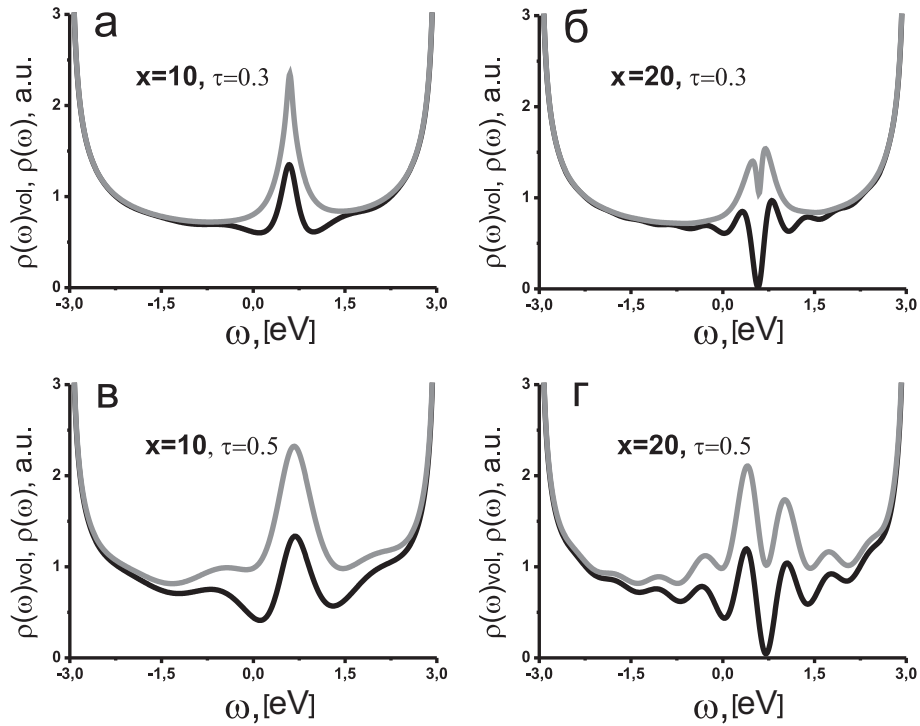


Рис. 2.3. Зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра (черный цвет) и локальной плотности поверхностных состояний (серый цвет) для одномерной цепочки атомов при различных значениях расстояния (x) от примесного атома вдоль цепочки. $a = 1$, $t = 1, 5$, $\varepsilon_d = 0, 6$.

ния амплитуды перехода между примесным атомом и соседними узлами цепочки, локальная плотность поверхностных состояний отличается от локальной плотности состояний непрерывного спектра только амплитудой провалов. В этом случае число провалов, их форма и положение на энергетической шкале не изменяются для локальной плотности поверхностных состояний по сравнению с локальной плотностью состояний непрерывного спектра (рис. 2.3 в,г). Такой результат можно объяснить следующим образом: с ростом амплитуды перехода между примесным атомом и соседними атомами в цепочке, возрастает скорость релаксации и, следовательно, происходит уширение лоренцевого пика от примесного атома, то есть учет вклада от плотности состояний примесного атома в этом случае не приводит к существенному изменению вида локальной плотности поверхностных состояний по сравнению с локальной плотностью состояний непрерывного спектра.

В общем случае произвольной поверхности с примесным атомом в одном из узлов, зависимость локальной плотности состояний от расстояния описывается выражением:

$$\rho(\omega, \vec{r}) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1} G_{\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1}^R(\omega) e^{i\vec{\kappa}\vec{r}} e^{-i\vec{\kappa}_1\vec{r}} \quad (2.13)$$

где $\vec{r} = (x, y)$ - описывают расстояние от примесного атома вдоль атомной цепочки и в направлении перпендикулярном цепочке, а $\vec{\kappa} = (\kappa_x, \kappa_y)$ и $\vec{\kappa}_1 = (\kappa_{x1}, \kappa_{y1})$ - волновые вектора. Необходимо отметить, что конкретный вид локальной плотности состояний зависит от типа решетки и примесного атома. Функция Грина $G_{\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1}^R(\omega)$ может быть найдена из системы уравнений:

$$\begin{aligned} G_{\kappa_x 0 dd}^R(\omega) &= G_{\kappa_x 0 \kappa_x 0}^{0R}(\omega) \tau G_{dd}^R(\omega) + G_{\kappa_x 0 \kappa_x 0}^{0R}(\omega) T \sum_{k_y} G_{\kappa_x \kappa_y dd}^R(\omega) \\ G_{0 \kappa_y dd}^R(\omega) &= G_{0 \kappa_y 0 \kappa_y}^{0R}(\omega) \mathfrak{S} G_{dd}^R(\omega) + G_{0 \kappa_y 0 \kappa_y}^{0R}(\omega) t \sum_{k_x} G_{\kappa_x \kappa_y dd}^R(\omega) \\ G_{dd}^R(\omega) &= G_{dd}^{0R}(\omega) + G_{dd}^{0R}(\omega) \tau \sum_{k_x} G_{\kappa_x 0 dd}^R(\omega) + G_{dd}^{0R}(\omega) \mathfrak{S} \sum_{k_y} G_{0 \kappa_y dd}^R(\omega) \\ G_{\vec{\kappa} dd}^R(\omega) &= G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}}^{0R}(\omega) \tau G_{\kappa_x 0 dd}^R(\omega) + G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}}^{0R}(\omega) \mathfrak{S} G_{0 \kappa_y dd}^R(\omega) \\ G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}_1}^R(\omega) &= G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}}^{0R}(\omega) + G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}}^{0R}(\omega) \tau G_{dd \kappa_1}^R(\omega) + G_{\vec{\kappa} \vec{\kappa}}^{0R}(\omega) \mathfrak{S} G_{dd \kappa_1}^R(\omega) \end{aligned} \quad (2.14)$$

В приведенной системе уравнений в качестве нулевой использована функция Грина $G_{\kappa_x, \kappa_y}^{0R}(\omega)$, вычисленная из уравнения Дайсона для двумерной анизотропной атомной цепочки без примесей, где в качестве нулевой функции Грина использована функция $G_{\kappa_x}^{0R}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_1 - 2t \cdot \cos(k_x a)}$.

$$G_{\kappa_x \kappa_y}^{0R}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_1 - 2t \cdot \cos(k_x a) - 2T \cdot \cos(k_y b)} \quad (2.15)$$

Просуммировав уравнения системы по волновым векторам k_x и k_{x1} (k_y и k_{y1}), получим выражения для локальной плотности состояний непрерывного спектра в направлении вдоль ($\rho_{vol}(\omega, x)$)/перпендикулярно ($\rho_{vol}(\omega, y)$) атомной цепочке.

$$\begin{aligned} \rho_{vol}(\omega, x) &= \rho_0(\omega) \cdot \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2 \cdot (1 - f(2k_x(\omega)x))}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \\ \rho_{vol}(\omega, y) &= \rho_0(\omega) \cdot \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2 \cdot (1 - f(2k_y(\omega)y))}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \end{aligned} \quad (2.16)$$

где $\gamma = (\tau^2 + \mathfrak{S}^2) \cdot \rho_0(\omega)$ описывает скорость релаксации электронов локализованного состояния, образованного примесным атомом; $\rho_0(\omega)$ - локальная плотность состояний для атомной решетки, состоящей из атомов одного типа. Функции $f(2k_x(\omega)x)$ и $f(2k_y(\omega)y)$ периодические и обладают следующим свойством $f(2k_x(\omega)x) = 1$ и $f(2k_y(\omega)y) = 1$, если $x = y = 0$. Для симметричной атомной решетки, когда выполнены условия $a = b$, $t = T$, $\tau = \mathfrak{S}$, и направление вдоль атомных цепочек эквивалентно направлению перпендикулярному атомным цепочкам $f(2k_x(\omega)x) = f(2k_y(\omega)y) = J_0(2k_x(\omega))$. Вид зависимостей $k_x(\omega)$ и $k_y(\omega)$ может быть найден из закона дисперсии для атомной решетки, который определяется выражением:

$$\omega(k_x, k_y) = 2t \cdot \cos(k_x a) + 2T \cdot \cos(k_y b) \quad (2.17)$$

Локальная плотность поверхностных состояний, как и в случае одномерной атомной цепочки, является результатом суммирования локальной плотности состояний непрерывного спектра и плотности состояний на примесном атоме.

Исследуем зависимости локальной плотности поверхностных состояний и локальной плотности состояний непрерывного спектра при фиксированном наборе значений параметров системы для различных значений расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки (x) (рис. 2.4) и в направлении перпендикулярном атомной цепочке (y) (рис. 2.5).

Полученные зависимости (рис. 2.4, рис. 2.5) демонстрируют, что наличие примесного атома в одном из узлов атомной решетки приводит, как и в случае одномерной атомной цепочки, к формированию провала в зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра, рассчитанной над примесным атомом, при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома (рис. 2.4а, рис. 2.5а). Зависимость локальной плотности поверхностных состояний, рассчитанная над примесным атомом, демонстрирует пик лоренцевой формы с провалом малой амплитуды при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома (рис. 2.4а, рис. 2.5а).

Рассмотрим зависимости локальной плотности поверхностных состояний и локальной плотности состояний непрерывного спектра от частоты при фиксированном наборе значений параметров системы для различных значений расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки

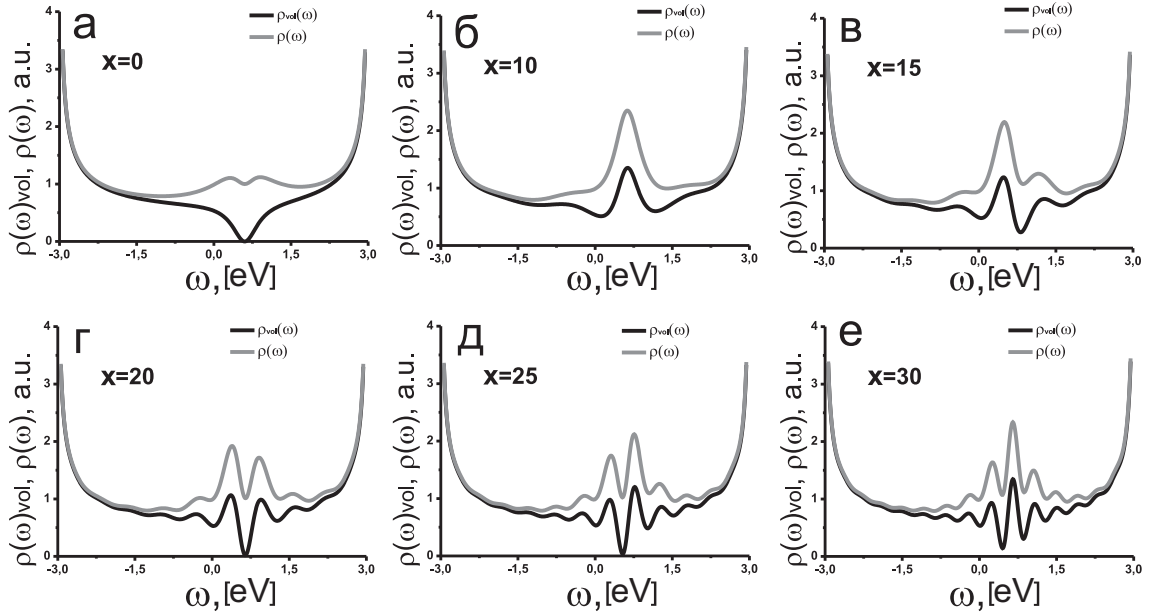


Рис. 2.4. Зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра (черный цвет) и зависимости локальной плотности поверхностных состояний (серый цвет) для анизотропной решетки из атомов одного типа для различных значений расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки. $a = 1$, $b = 2$, $t = 1, 5$, $T = 1, 2$, $\tau = 0, 6$, $\mathfrak{S} = 0,3$, $\varepsilon_d = 0, 6$.

(x) (рис. 2.4б-е) и в направлении перпендикулярном атомной цепочке (y) (рис. 2.5 б-е).

Сначала исследуем локальную плотность состояний непрерывного спектра (кривые черного цвета на рис. 2.4, рис. 2.5). Для обоих взаимно перпендикулярных направлений с ростом расстояния от примесного атома ($x, y \neq 0$) в зависимостях локальной плотности состояний непрерывного спектра формируется набор провалов. Число провалов и их расположение на энергетической шкале для обоих взаимно перпендикулярных направлений могут быть найдены аналогично случаю с одномерной цепочкой из закона дисперсии для атомной решетки. Величины амплитуд и ширин провалов в плотности состояний, как и в случае расчетов над примесным атомом, зависят от параметров системы.

Для конечного значения расстояния от примесного атома, отличного от нуля, вдоль цепочки или в направлении перпендикулярном атомной цепочке при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$), в локальной плотности состояний непрерывного спектра может возникать не провал (рис. 2.4г,д, рис. 2.5д,е), а пик (рис. 2.4в,е, рис. 2.5в,г). При фиксированном наборе значений параметров системы наличие пика или провала в локальной плотности состояний определяется величиной расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки.

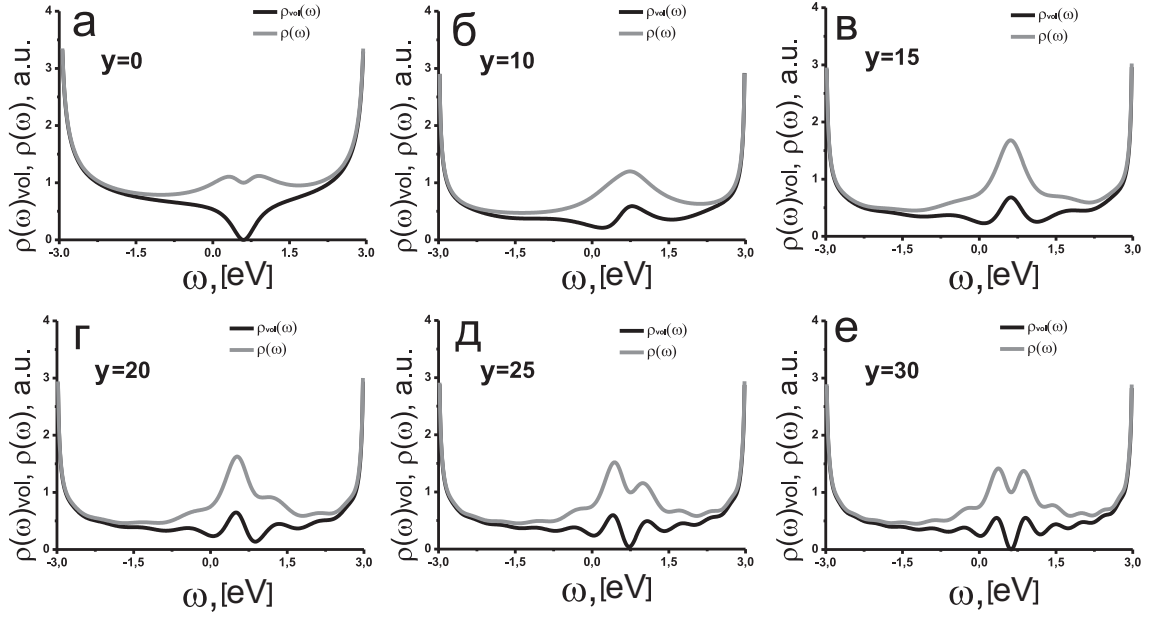


Рис. 2.5. Зависимости локальной плотности состояний непрерывного спектра (черный цвет) и зависимости локальной плотности поверхностных состояний (серый цвет) для анизотропной решетки из атомов одного типа для различных значений расстояния от примесного атома в направлении перпендикулярном атомной цепочке. $a = 1$, $b = 2$, $t = 1, 5$, $T = 1, 2$, $\tau = 0, 6$, $\mathfrak{F} = 0.3$, $\varepsilon_d = 0, 6$.

Для обоих взаимно перпендикулярных направлений был обнаружен интервал расстояний, в котором происходит чередование в появлении пиков и провалов как в локальной плотности состояний непрерывного спектра, так и в локальной плотности поверхностных состояний (рис. 2.4в-е, рис. 2.5в-е). При этом провалу в одном из направлений может соответствовать появление пика в перпендикулярном направлении при одном и том же значении расстояния от примесного атома. Рассмотрим эту пространственную область более подробно.

Существует минимальное расстояние от примесного атома, при котором в обоих направлениях при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома, одновременно формируются пики в зависимостях локальной плотности состояний непрерывного спектра и локальной плотности поверхностных состояний (рис. 2.4в, рис. 2.5в). С ростом расстояния в направлении перпендикулярном атомной цепочке наблюдается резонансный пик (рис. 2.5г), а в направлении вдоль атомной цепочки появляется провал на резонансной частоте (рис. 2.4г). Дальнейшее увеличение расстояния приводит к формированию провала в направлении перпендикулярном атомной цепочке (рис. 2.5д), при этом в направлении вдоль атомной цепочки продолжает существовать провал (рис. 2.4д). При последующем

росте расстояния от примесного атома, в направлении перпендикулярном атомной цепочке существует резонансный провал (рис. 2.5e), а в направлении вдоль атомной цепочки происходит формирование резонансного пика (рис. 2.4e).

Рассмотрим локальную плотность поверхностных состояний (кривые серого цвета на рис. 2.4, рис. 2.5). Представленные зависимости позволяют сделать вывод: все закономерности, обнаруженные для локальной плотности состояний непрерывного спектра, остаются справедливыми и для локальной плотности поверхностных состояний.

Таким образом, продемонстрировано, что учет влияния локализованного состояния, образованного примесным атомом, на вид локальной плотности состояний непрерывного спектра приводит к принципиальному изменению локальной плотности поверхностных состояний. Детальное исследование локальной плотности поверхностных состояний позволило объяснить эффекты "включения" (пик в плотности состояний) и "выключения" (провал в плотности состояний) примесного атома, расположенного в полупроводниковой матрице, при изменении расстояния от примеси, проявляющиеся в спектрах туннельного тока, измеренных в окрестности примесных атомов [83, 274, 275].

§ 2.2. Особенности туннельных спектров в окрестности примесных атомов

Исследуем зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте в окрестности примесных атомов. Для этого учтем возможность туннелирования электронов с поверхности полупроводника в острие зонда СТМ (рис. 2.6). Сначала рассмотрим случай, когда примесный атом находится в подповерхностном слое, и измерение туннельной проводимости проводится над примесным атомом.

Выражение для туннельного тока имеет вид:

$$I \propto \frac{2\pi e}{\hbar} \int d\omega T^2 \rho_p(\omega) \rho_k(\omega, x) [n_p^0(\omega) - n_k^0(\omega - eV)] \quad (2.18)$$

где T -амплитуда туннелирования, $\rho_p(\omega)$ -плотность электронных состояний в острие зонда СТМ, $\rho_k(\omega, x) = \text{Im} \sum_{\kappa\kappa'} G_{\kappa\kappa'}^R(\omega) e^{i\kappa x} e^{-i\kappa' x}$ - плотность состояний непрерывного спектра на поверхности при наличии

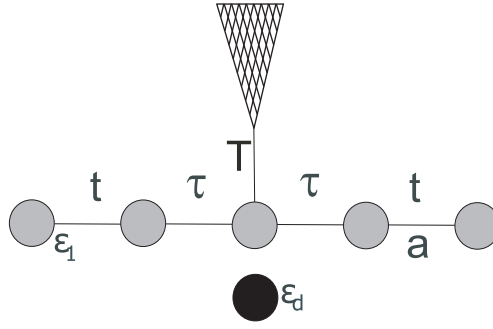


Рис. 2.6. Схематическое изображение туннельного контакта при наличии примесного атома в подповерхностном слое.

локализованного состояния, сформированного примесным атомом, n_k , n_p -фермиевские функции распределения электронов. Тогда измеренная над примесным атомом туннельная проводимость определяется с помощью выражения:

$$\sigma \propto T^2 \rho_p(\omega) \rho_k(\omega, x) \quad (2.19)$$

Функция Грина $G_{kk'}^R(\omega)$ может быть найдена из системы уравнений (2.6).

Полагая $x = 0$ в выражении (2.8) для локальной плотности состояний, измеренной над примесным атомом, получаем:

$$\rho_k(\omega, x = 0) = \rho_0(\omega) \cdot \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \quad (2.20)$$

Зависимости туннельной проводимости над примесным атомом, рассчитанные для различных значений параметров туннельного контакта, представлены на рис. 2.7.

Полученные зависимости показывают, что наличие примесного атома в одном из подповерхностных слоев приводит к формированию провала в измеряемой над примесным атомом локальной туннельной проводимости при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома (рис. 2.7). Ширина провала определяется скоростями релаксации электронов проводимости в системе.

Теперь рассмотрим случай, когда примесный атом находится в поверхностном слое, а измерение локальной туннельной проводимости проводится на расстоянии x от примесного атома, значительно превышаю-

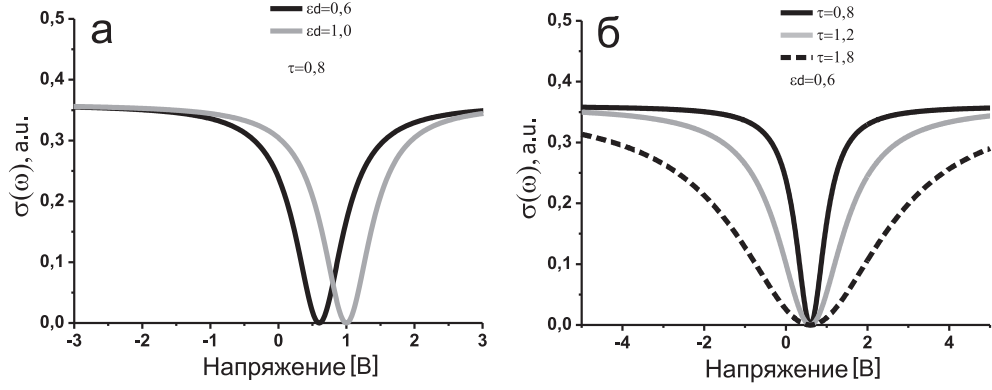


Рис. 2.7. Зависимости туннельной проводимости измеренной над примесным атомом, находящимся в подповерхностном слое, полученные в результате численного анализа для различных значений параметров туннельного контакта. $a = 1$, $t = 1,5$, $T = 0,3$, $\rho_p = 2$.

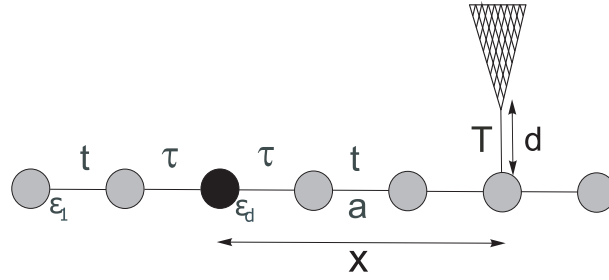


Рис. 2.8. Схематическое изображение туннельного контакта при наличии примесного атома в поверхностном слое. Измерения локальной проводимости проводятся вдали от примесного атома $x \gg d$. x - расстояние от примесного атома вдоль поверхности. d - расстояние от примесного атома перпендикулярно поверхности.

щим расстояние d между поверхностью полупроводника и зондом СТМ (рис. 2.8).

В этом случае в выражении для локальной проводимости (2.19) необходимо учесть зависимость локальной плотности состояний непрерывного спектра от расстояния. Выражение для зависимости локальной плотности состояний от расстояния получено в параграфе 2.1 и имеет вид:

$$\rho_k(\omega, x) = \rho_0(\omega) \cdot \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2 \cdot (1 - \cos(2k(\omega)x))}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma^2} \quad (2.21)$$

Исследуем зависимости локальной туннельной проводимости при фиксированном наборе значений параметров системы для различных значений расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки (рис. 2.9).

Представленные зависимости позволяют сделать вывод, что зависимость локальной проводимости от напряжения на туннельном контакте при фиксированном значении расстояния от примесного атома имеет осциллирующий вид с особенностью при напряжении, совпадающем с энергией

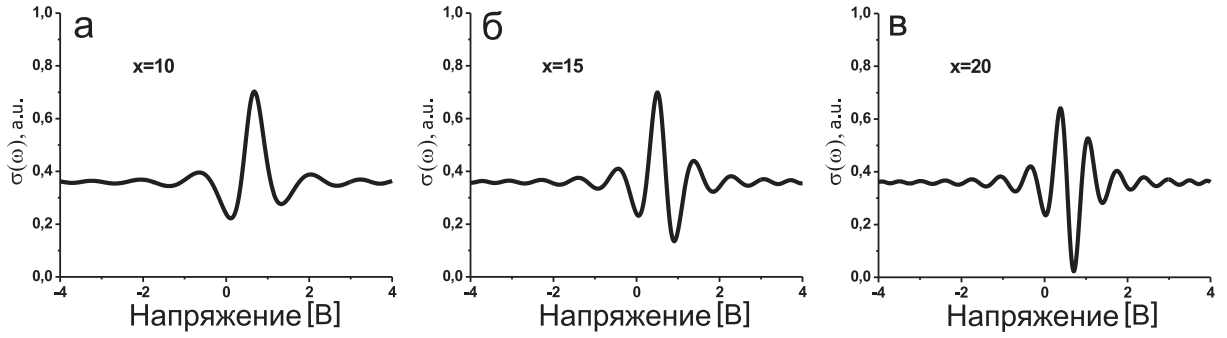


Рис. 2.9. Зависимости туннельной проводимости измеренной вдали от примесного атома, находящегося в поверхностном слое, полученные в результате численного анализа для различных значений x расстояния от примесного атома. $a = 1$, $t = 1,5$, $T = 0,3$, $\tau = 0,8$, $\varepsilon = 0,6$, $\nu_p = 2$.

уровня примесного атома. Для конечного значения расстояния от примесного атома, отличного от нуля, вдоль атомной цепочки при совпадающем с энергией уровня примесного атома значении напряжения в локальной проводимости может возникать провал (рис. 2.9в) или пик (рис. 2.9а). При фиксированном наборе значений параметров туннельного контакта наличие пика или провала определяется значением расстояния от примесного атома вдоль атомной цепочки (зависит от точки измерения туннельной проводимости).

Таким образом, предложенная модель позволяет описать эффекты ”включения” (пик) и ”выключения” (провал) примесного атома в локальной проводимости, измеряемой методом СТМ/СТС, при увеличении расстояния от примеси [83, 274, 275].

§ 2.3. Интерференционные эффекты при туннелировании через локализованные состояния. Эффект Фано

Интерференция резонансного канала туннелирования электронов через квантовую точку (примесный атом) и прямого канала туннелирования между берегами туннельного контакта называется эффектом Фано. Этот эффект приводит к характерным особенностям туннельных характеристик. В отсутствие кулоновского взаимодействия возникает типичная асимметричная форма зависимости туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте. Такую форму линии можно наблюдать при исследовании линейного транспорта через систему множественных квантовых точек или при изучении методом СТМ/СТС плотности состояний на

поверхности металлов и полупроводников в окрестности примесных атомов [101, 115, 130–132]. При исследовании Фано резонансов в локальной туннельной проводимости обычно рассматривают системы с бесконечной величиной кулоновских корреляций [111, 126, 135], либо исследуют системы с конечной величиной кулоновского взаимодействия в случае, когда острие зонда СТМ расположено над примесным атомом [128, 143].

Рассмотрим систему с двумя каналами туннелирования в отсутствие кулоновских корреляций. Гамильтониан \hat{H} может быть записан в виде:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{tip} \\
\hat{H}_0 &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} \\
\hat{H}_{tun} &= \sum_k \tau c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + \sum_p T c_{d\sigma}^+ c_{p\sigma} + \sum_{kp} t c_{k\sigma}^+ c_{p\sigma} + h.c. \\
\hat{H}_{imp} &= \sum_{d\sigma} \varepsilon_d c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Индексы k и p относятся к состояниям непрерывного спектра полупроводника и острия соответственно. Индекс d соответствует электронным состояниям примеси. $c_{d\sigma}$ - оператор уничтожения электронов в локализованном состоянии на примеси со спином σ . Гамильтониан \hat{H}_0 описывает состояния непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Туннельный гамильтониан \hat{H}_{tun} описывает резонансное туннелирование между состояниями непрерывного спектра через примесное состояние и прямое туннелирование между состояниями непрерывного спектра. Оператор \hat{H}_{imp} описывает локализованные электроны на примеси.

В случае туннелирования через локализованное состояние, образованное одиночным примесным атомом, выражение для туннельного тока, протекающего через два интерферирующих канала, имеет вид:

$$\begin{aligned}
I_R = e \frac{d \langle n_R \rangle}{dt} &= -\frac{e}{\hbar} \sum_{k,p,\sigma} \int d\omega [t G_{kp}^<(\omega) + h.c.] - \\
&\quad - \frac{e}{\hbar} \sum_{p,\sigma} \int d\omega [T G_{dp}^<(\omega) + h.c.]
\end{aligned} \tag{2.23}$$

где $G_{kp}^<(t) = i \langle c_{k\sigma}^+ c_{p\sigma}(t) \rangle$ и $G_{dp}^<(t) = i \langle c_{d\sigma}^+ c_{p\sigma}(t) \rangle$ - келдышевские функции Грина. Используя диаграммную технику Келдыша для неравновесных процессов [67] можно получить следующее выражение для туннельного тока:

$$I = \frac{2e}{\hbar} \int d\omega F(\omega) \cdot (f_L(\omega) - f_R(\omega)) \quad (2.24)$$

где $f_{L(R)}(\omega)$ - функции распределения Ферми электронов в левом(правом) берегу туннельного контакта, выражение для величины $F(\omega)$ имеет вид:

$$F(\omega) = \frac{4\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}}{(1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})^2} + A \cdot \text{Re}G_{dd}^R(\omega) + B \cdot \text{Im}G_{dd}^R(\omega) \quad (2.25)$$

где коэффициенты A и B определяются выражениями:

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{\frac{4\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2} \cdot \frac{4\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}}{(1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})^2} \left(1 - \frac{4\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}}{(1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})^2}\right)} \cdot \\ &\quad \cdot \frac{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}}{1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}} \\ B &= -\frac{1}{2} \cdot \left[\frac{4\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2} \cdot \left(1 - \frac{4\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}}{(1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})^2}\right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{4\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}}{(1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})^2} \right] \cdot \frac{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}}{1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

$\nu_{0k}(\nu_{0p})$ -плотности состояний в берегах туннельного контакта. Скорости релаксации γ_{kd} , γ_{pd} описывают туннелирование электронов из локализованных состояний примеси в состояния непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Скорость релаксации γ_{kp} соответствует прямым переходам между состояниями непрерывного спектра $\sum_p T^2 \text{Im}G_{pp}^{0R} = \gamma_{pd}$; $\sum_p t^2 \text{Im}G_{pp}^{0R} = \gamma_{kp}$; $\sum_k \tau^2 \text{Im}G_{kk}^{0R} = \gamma_{kd}$. В случае отсутствия кулоновского взаимодействия функция Грина $G^R(\omega)$ может быть вычислена точно и имеет вид:

$$G_{dd}^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - \Sigma(\omega)} \quad (2.27)$$

где

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega) &= -\frac{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}}{2 \cdot (1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})} \cdot \sqrt{\frac{4\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2}} \cdot \sqrt{\pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p}} - \\ &\quad - i \frac{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}}{2 \cdot (1 + \pi^2 t^2 \nu_{0k} \nu_{0p})} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Тогда выражение для локальной туннельной проводимости можно записать в следующем виде:

$$\frac{dI}{dV}(\omega) = A \cdot \text{Re}G_{dd}^R(\omega) + B \cdot \text{Im}G_{dd}^R(\omega) \quad (2.29)$$

Выражение (2.29) в случае туннелирования только через локализованное состояние, образованное примесным атомом, (в отсутствие прямого туннелирования между берегами туннельного контакта) имеет простой вид:

$$\frac{dI}{dV}(\omega) = \frac{\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}} \cdot \text{Im}G_{dd}^R(\omega) \quad (2.30)$$

Таким образом, эффект Фано возникает в результате интерференции нескольких конкурирующих каналов для транспорта электронов и может быть обнаружен экспериментально методом СТМ/СТС при измерении локальной туннельной проводимости в окрестности примесных атомов. Эффект Фано проявляется в формировании асимметричного вида особенностей в локальной туннельной проводимости. Однако, для полноценного и адекватного анализа туннельных спектров, кроме учета интерференционных эффектов, связанных с наличием нескольких конкурирующих каналов для туннелирования электронов, необходимо также учитывать эффекты, связанные с кулоновским взаимодействием локализованных электронов. Исследование особенностей туннельного транспорта, обусловленных одновременно наличием нескольких каналов для туннелирования и кулоновскими корреляциями будет рассмотрено в следующем параграфе [270, 271].

§ 2.4. Эффект Фано при наличии кулоновского взаимодействия локализованных на примеси электронов

Рассмотрим процессы туннелирования электронов между поверхностью полупроводника и металлическим острием зонда СТМ через глубокую и мелкую примеси при наличии в системе кулоновского взаимодействия (рис. 2.10). Далее под глубокой будем понимать примесь, для которой величина соотношения между значением энергии уровня и его шириной много больше единицы. Мелкой будем называть примесь, для которой уровень энергии расположен в окрестности уровня Ферми. Будем исследовать

локальную плотность состояний в окрестности примесного атома. Поверхность будем считать состоящей из одинаковых атомов с уровнями энергии ε_1 . Кроме того, положим, что амплитуды переходов между атомами поверхности в соседних узлах одинаковы и имеют величину \mathfrak{S} . Расстояние между атомами поверхности a . В одном из узлов атомной решетки расположен примесный атом с энергией ε_d , амплитуда туннельных переходов между примесным атомом и состояниями непрерывного спектра поверхности τ , а между примесным атомом и состояниями непрерывного спектра острья T . Учтем также возможность прямого туннелирования между состояниями непрерывного спектра полупроводника и зонда СТМ. Амплитуду прямого туннелирования обозначим t .

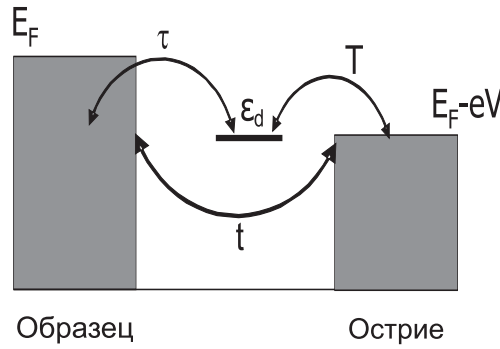


Рис. 2.10. Схематическое изображение прямого и резонансного туннелирования.

При наличии в системе кулоновского взаимодействия, гамильтониан системы \hat{H} может быть записан в виде:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{tip} \\ \hat{H}_0 &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{kk'\sigma} \mathfrak{S} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + h.c. \\ \hat{H}_{tun} &= \sum_k \tau c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + \sum_p T c_{d\sigma}^+ c_{p\sigma} + \sum_{kp} t c_{k\sigma}^+ c_{p\sigma} + h.c. \\ \hat{H}_{imp} &= \sum_{d\sigma} \varepsilon_d c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma} + U n_{d\sigma} n_{d-\sigma}; \hat{H}_{tip} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma}\end{aligned}\quad (2.31)$$

Индексы k и p относятся к состояниям непрерывного спектра полупроводника и острья соответственно. Индекс d соответствует электронным состояниям примеси. U - величина кулоновского взаимодействия локализованных электронов; $n_{d\sigma} = c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma}$, $c_{d\sigma}$ - оператор уничтожения электронов в локализованном состоянии на примеси со спином σ . Гамильтониан \hat{H}_0 описывает атомные цепочки на поверхности полупроводника с переходами между

соседними узлами без наличия примеси. Туннельный гамильтониан \hat{H}_{tun} описывает резонансное туннелирование между состояниями непрерывного спектра через примесное состояние и прямое туннелирование между состояниями непрерывного спектра поверхности и острия зонда СТМ. Оператор \hat{H}_{imp} описывает локализованные электроны на примеси, а слагаемое \hat{H}_{tip} относится к состояниям непрерывного спектра на острие.

Применяя диаграммную технику Келдыша для неравновесных процессов [67] можно получить выражение для пространственного распределения локальной туннельной проводимости без учета кулоновских корреляций [270]. Функции Грина $G_{pk}^<(\omega)$ и $G_{dp}^<(\omega)$ в выражении (2.23) с помощью системы уравнений Дайсона выразим через запаздывающие и опережающие функции Грина $G_{pk(kd)}^{R(A)}(\omega)$. Система уравнений для функции Грина $G_{dp}^<(\omega)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{pd}^<(\omega) &= [G_{pp}^0(\omega)TG_{dd}(\omega)]^< + [G_{pp}^0(\omega)tG_{kd}(\omega)]^< \\ G_{dd}^<(\omega) &= G_{dd}^{0<}(\omega) + [G_{dd}^0(\omega)\tau G_{kd}(\omega)]^< + [G_{dd}^0(\omega)TG_{pd}(\omega)]^< \\ G_{kd}^<(\omega) &= [G_{kk}^0(\omega)\tau G_{dd}(\omega)]^< + [G_{kk}^0(\omega)tG_{pd}(\omega)]^< \end{aligned} \quad (2.32)$$

а для функции $G_{pk}^<(\omega)$:

$$\begin{aligned} G_{pk'}^<(\omega) &= \sum_{k''} [G_{pp}^0(\omega)tG_{k''k'}(\omega)]^< + [G_{pp}^0(\omega)TG_{dk'}(\omega)]^< \\ G_{dk'}^<(\omega) &= \sum_{k''} [G_{dd}^0(\omega)\tau G_{k''k'}(\omega)]^< + [G_{dd}^0(\omega)TG_{pk'}(\omega)]^< \\ G_{k''k'}^<(\omega) &= G_{kk}^{0<}(\omega) + \sum_p [G_{kk}^0(\omega)tG_{pk'}(\omega)]^< + [G_{kk}^0(\omega)\tau G_{dk'}(\omega)]^< \end{aligned} \quad (2.33)$$

Для расчета локальной туннельной проводимости необходимо провести замену амплитуды туннельного перехода t на величину $te^{ikx}e^{-ipx}$, что позволит учесть в расчетах зависимость туннельной проводимости от расстояния от примесного атома вдоль поверхности. Подставив выражения для функций $G_{dp}^<(\omega)$ и $G_{pk}^<(\omega)$, полученные из систем уравнений (2.32) и (2.33), в выражение для туннельного тока (2.23), выполнив суммирование по индексам k и k' и взяв мнимую часть, получим выражение, которое описывает локальную туннельную проводимость:

$$\frac{dI}{dV}(\omega, x) = \sqrt{\gamma_{kp}\gamma_{kd}\gamma_{pd}\nu_k^0} \text{Re}G_{dd}^R(\omega) \cos(2k_x(\omega)x) +$$

$$\begin{aligned}
& + \gamma_{kp}(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})\nu_k^0 \text{Im}G_{dd}^R(\omega) \cos(2k_x(\omega)x) + \\
& + \frac{\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}} \text{Im}G_{dd}^R(\omega) + \frac{\gamma_{kd}^2\gamma_{pd}\gamma_{kp}(\omega - \varepsilon_d) \cos(2k_x(\omega)x)}{((\omega - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2)^2} + \\
& + \gamma_{kp}\nu_k^0 \left(1 + \frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + \gamma_{kd}^2 - \gamma_{pd}(\omega - \varepsilon_d)}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2}\right) \cdot \\
& \cdot \left(\frac{(\omega - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2(1 - \cos(2k_x(\omega)x))}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2} + \right. \\
& \left. + \frac{\gamma_{pd}(\gamma_{pd} + \gamma_{kd}) \cos(2k_x(\omega)x)}{(\omega - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_{kd} + \gamma_{pd})^2}\right) \tag{2.34}
\end{aligned}$$

где запаздывающая функция Грина для электронов, локализованных на примесном атоме, имеет вид:

$$G_{dd}^R(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - i(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})} \tag{2.35}$$

ν_k^0 - равновесная плотность состояний полупроводника. Выражение для $k_x(\omega)$ может быть найдено из закона дисперсии для одномерной атомной цепочки:

$$\omega(k_x) = 2\mathfrak{S} \cdot \cos(k_x a) \tag{2.36}$$

На рисунках **2.11** и **2.12** представлены результаты расчета локальной туннельной проводимости в зависимости от величины напряжения на туннельном контакте для различных значений расстояния от примеси и различных соотношений между амплитудами туннельных переходов в исследуемой системе. Рисунок **2.11** соответствует случаю, когда величина амплитуды прямого туннелирования между берегами туннельного контакта t превосходит величины амплитуд резонансного туннелирования через примесный атом T и τ (рис. **2.10**). В этом случае туннельная проводимость, вычисленная над примесным атомом (рис. **2.11a**), имеет вид Фано резонанса из-за интерференции между резонансным и нерезонансным каналами туннелирования. В случае, когда величина напряжения совпадает с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$), в зависимости локальной туннельной проводимости от напряжения наблюдается провал. Степень асимметрии формы линии в резонансе зависит от соотношения между величинами амплитуд туннелирования через резонансный и нерезонансный каналы.

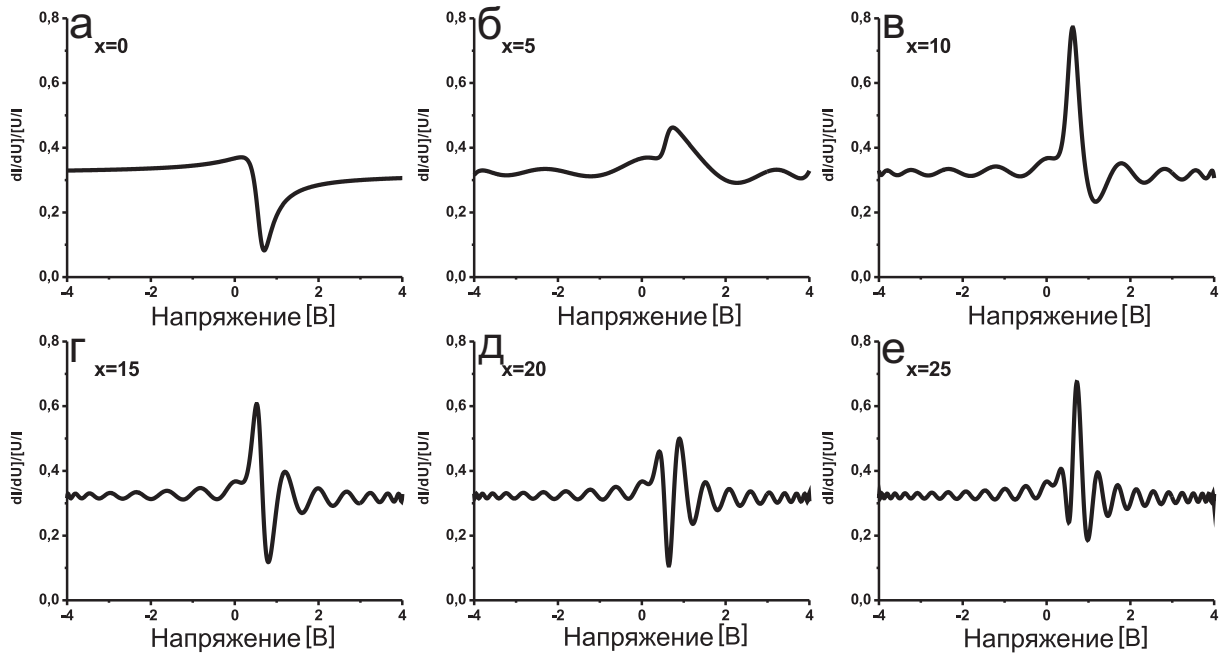


Рис. 2.11. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте, рассчитанная для различных значений расстояния от примеси x в отсутствие кулоновского взаимодействия в случае двух интерферирующих каналов туннелирования. Значения параметров $a = 1$, $t = 0,40$, $T = 0,25$, $\tau = 0,35$, $\mathfrak{S} = 1,00$, $\varepsilon_d = 0,60$, $\nu_k^0 = 1$ одинаковы для всех графиков.

При удалении от примесного атома в локальной туннельной проводимости наблюдается формирование серии провалов, число провалов возрастает с увеличением расстояния. В случае, когда величина приложенного напряжения совпадает с энергией уровня примесного атома, в локальной туннельной проводимости, измеренной на конечном расстоянии от примеси, может наблюдаться не только провал (рис. 2.11а,д), но и пик (рис. 2.11б,е). Для фиксированного набора параметров наличие пика или провала в зависимости локальной туннельной проводимости от напряжения при резонансе определяется величиной расстояния от примеси. Кроме того, существуют значения расстояний, при которых не происходит формирования ни пика ни провала (рис. 2.11г). Замещение провала пиком в туннельной проводимости в случае, когда величина приложенного напряжения совпадает с энергией примесного уровня происходит из-за интерференции между прямым и резонансным каналами туннелирования (между действительной и мнимой частями примесной функции Грина). Формирование асимметричного провала в локальной туннельной проводимости было экспериментально обнаружено в работе [131].

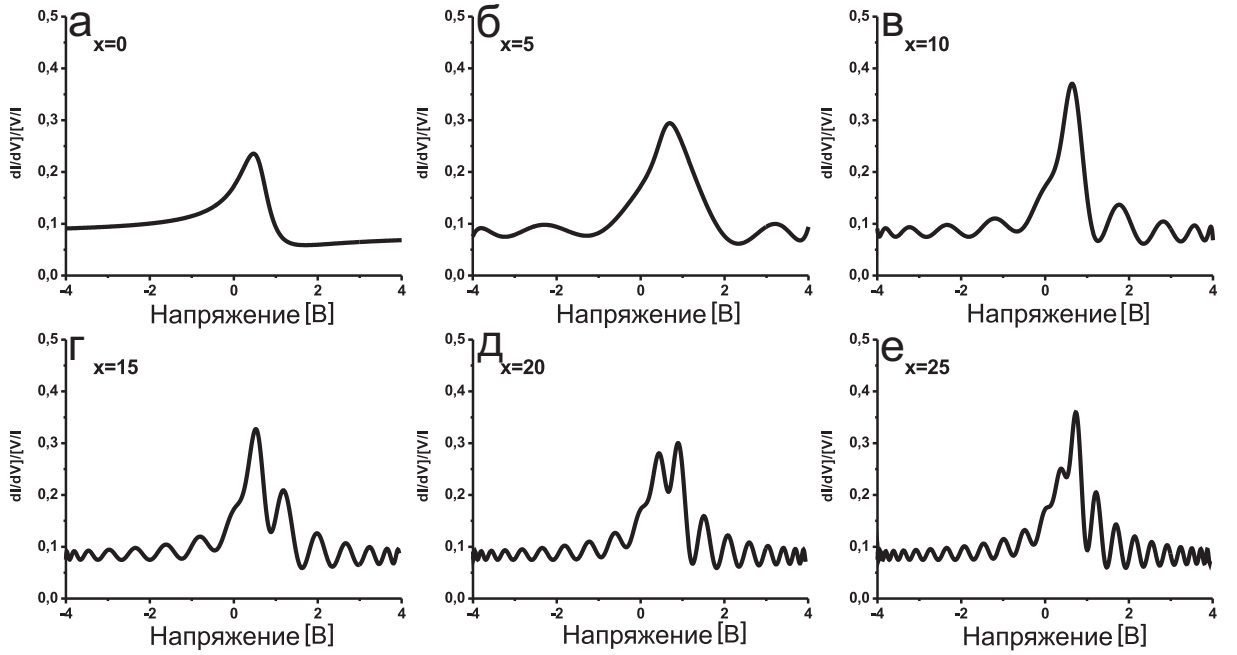


Рис. 2.12. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте, рассчитанная для различных значений расстояния от примеси x в отсутствие кулоновского взаимодействия в случае двух интерферирующих каналов туннелирования. Значения параметров $a = 1$, $t = 0,20$, $T = 0,40$, $\tau = 0,50$, $\mathfrak{S} = 1,00$, $\varepsilon_d = 0,60$, $\nu_k^0 = 1$ одинаковы для всех графиков.

Рисунок **2.12** соответствует случаю, когда величины амплитуд резонансного туннелирования через примесный атом T и τ (рис. **2.10**) превосходят величину амплитуды прямого туннелирования между берегами туннельного контакта t . В этом случае наблюдается формирование асимметричного пика в туннельной проводимости, вычисленной над примесным атомом при резонансе ($\omega = \varepsilon_d$) (рис. **2.12а**). С увеличением расстояния от примеси происходит изменение формы пика, вызванное эффектами интерференции между прямым и резонансным каналами туннелирования (рис. **2.12б,в**). Дальнейшее увеличение расстояния от примеси приводит к расщеплению резонансного пика (рис. **2.12г-е**). Амплитуда провала, формирующегося при расщеплении резонансного пика, зависит от расстояния (уменьшается с ростом расстояния) для фиксированного набора параметров системы. Кроме того, интерференция между прямым и резонансным каналами туннелирования приводит к различному поведению амплитуд расщепленных пиков с ростом расстояния. Амплитуда пика, соответствующего меньшей величине напряжения на туннельном контакте, уменьшается с увеличением расстояния от примеси, а амплитуда пика, соответствующе-

го большей величине напряжения на туннельном контакте, возрастает (рис. 2.12г-е).

Исследуем, как изменяется выражение (2.34) для локальной туннельной проводимости при наличии в системе кулоновского взаимодействия в случае туннелирования через локализованное состояние, образованное глубоким и мелким примесным атомом. Для расчета чисел заполнения на уровне энергии мелкой и глубокой примеси важно правильным образом выбрать модельное приближение. Для мелкой примеси эффект влияния кулоновского взаимодействия на положение уровня энергии можно рассматривать как плавное движение уровня в среднем поле. В результате происходит смещение уровня энергии, и функцию Грина можно правильно записать, заменив исходное значение уровня энергии на новое с учетом наличия кулоновского взаимодействия локализованных электронов. В случае глубокой примеси уровень энергии находится глубоко под уровнем Ферми, и функция Грина примесного состояния содержит два слагаемых. Система будет обладать разной энергией в зависимости от того приходит электрон в результате туннелирования на свободный уровень или электрон попадает на уровень, который уже содержит электрон с другим направлением спина. При анализе туннелирования через глубокую примесь, будем использовать приближение Хаббард-I (гамильтониан имеет вид (2.31)). Учет кулоновских корреляций в такой системе приводит к формированию в энергетическом спектре системы двух сильно различающихся по энергии состояний ε_d и $\varepsilon_d + U$ вместо одного исходного состояния с энергией ε_d . Целесообразно использовать приближение, в котором наибольший параметр в модели (величина кулоновского взаимодействия U) включен в функцию примесную Грина $G_{dd}^{0R\sigma}(\omega)$. Таким образом, можно записать выражение для запаздывающей примесной функции Грина $G_{dd}^{0R\sigma}(\omega)$:

$$G_{dd}^{0R\sigma}(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - \Sigma(\omega)}$$

$$\Sigma(\omega) = \frac{n_{d-\sigma}U(\omega - \varepsilon_d)}{\omega - \varepsilon_d - (1 - n_{d-\sigma})U - i\delta} \quad (2.37)$$

Используя диаграммную технику Келдыша [67, 271], при помощи системы уравнений Дайсона может быть определена запаздывающая функция Грина для локализованного состояния, образованного примесным атомом:

$$G_{dd}^{R\sigma} = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d - \Sigma(\omega) - i(\gamma_{kd} + \gamma_{pd})} \quad (2.38)$$

Для расчета пространственного распределения локальной туннельной проводимости в окрестности глубокой примеси при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов нужно в выражении (2.34) вместо функций Грина $ImG_{dd}^R(\omega)$ и $ReG_{dd}^R(\omega)$ использовать функции $ImG_{dd}^{R\sigma}(\omega)$ и $ReG_{dd}^{R\sigma}(\omega)$. Также следует учесть наличие спина у электронов, что приводит к появлению дополнительного суммирования по индексу σ . В результате в выражении (2.34) появляется дополнительный множитель равный 2. Для вычисления мнимых частей функций Грина $ImG_{dd}^{R\sigma}(\omega)$ и $ReG_{dd}^{R\sigma}(\omega)$ требуется решить систему самосогласованных уравнений. В систему входят два уравнения для функции $ImG_{dd}^{R\pm\sigma}(\omega)$, вычисленной при помощи выражения (2.38) и три уравнения, которые определяют поведения неравновесных чисел заполнения на примеси:

$$\begin{aligned} n_{d\mp\sigma} &= -\frac{1}{\pi} \int d\omega n_{d\mp\sigma}(\omega) ImG_{dd}^{R\pm\sigma}(\omega, n_{d\pm\sigma}) \\ n_{d\sigma}(\omega) &= n_{d-\sigma}(\omega) = \frac{\gamma_{kd}n_k^0(\omega) + \gamma_{pd}n_p^0(\omega)}{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

где $n_k^0(\omega)$ и $n_p^0(\omega)$ равновесные фермиевские числа заполнения в берегах туннельного контакта.

На рисунке **2.13** приведены результаты расчета локальной туннельной проводимости в зависимости от напряжения на туннельном контакте для различных расстояний от глубокой примеси. Полученные зависимости демонстрируют образование провала в зависимости локальной туннельной проводимости, рассчитанной над примесным атомом, при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$), как при наличии (рис. **2.13а**, черная кривая), так и в отсутствии кулоновского взаимодействия (рис. **2.13а**, серая кривая). При наличии кулоновского взаимодействия, в зависимости туннельной проводимости от напряжения, кроме резонансного провала наблюдается пик при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома, смещенного на величину кулоновского взаимодействия ($\omega = \varepsilon_d + U$).

Формирование пика или провала в локальной туннельной проводимости для фиксированного набора параметров, описывающих туннельный

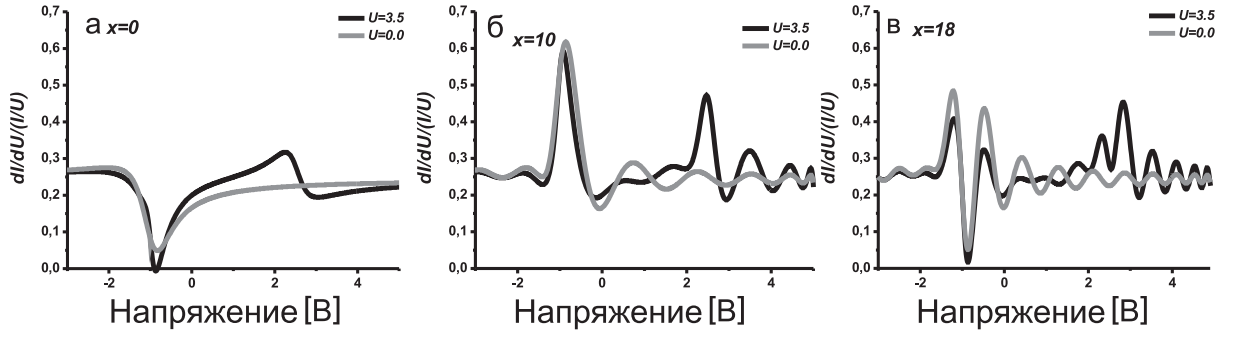


Рис. 2.13. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте для случая глубокой примеси, рассчитанная для различных значений расстояния от примеси x в отсутствие (серая линия) и при наличии (черная линия) кулоновского взаимодействия U . Значения параметров $a = 1$, $t = 0,22$, $T = 0,18$, $\tau = 0,50$, $\mathfrak{Z} = 1,00$, $\varepsilon_d = -1,00$, $U = 3,50$, $\nu_k^0 = 1$ одинаковы для всех графиков.

контакт, определяется величиной x расстояния от примесного атома.

Наличие кулоновского взаимодействия в системе с глубокой примесью приводит к незначительному сдвигу резонансной особенности, соответствующей напряжению, совпадающему с энергией уровня примесного атома. С ростом расстояния от примесного атома и с ростом скоростей релаксации в рассмотренной модели не наблюдалось изменения формы резонансной особенности (уширение отсутствовало).

Теперь рассмотрим, как изменится выражение (2.34) для локальной туннельной проводимости в случае туннелировании через мелкую примесь с учетом кулоновского взаимодействия. Для описания роли кулоновского взаимодействия в системе используем метод среднего поля, который основан на предположении, что положение уровня энергии примесного атома зависит от величины кулоновского взаимодействия и неравновесных чисел заполнения на примеси. Изменение положения уровня энергии, связанное с наличием в системе кулоновского взаимодействия, может быть найдено при помощи выражения:

$$\tilde{\varepsilon}_d = \varepsilon_d + U \langle n_d \rangle \quad (2.40)$$

где ε_d - положение уровня энергии примесного атома без учета кулоновского взаимодействия. Неравновесные числа заполнения на примеси n_d должны удовлетворять условию самосогласования:

$$n_d = -\frac{1}{\pi} \int d\omega n_d(\omega) \text{Im} G_{dd}^R(\omega) \quad (2.41)$$

где функция $\text{Im} G_{dd}^R(\omega)$ определяется из уравнения (2.35), в котором вместо величины ε_d используется величина $\tilde{\varepsilon}_d$. Числа заполнения на примеси $n_d(\omega)$ могут быть найдены из кинетических уравнений для функций Грина $G^<$ [271]:

$$n_d(\omega) = \frac{\gamma_{kd} n_k^0(\omega) + \gamma_{pd} n_p^0(\omega)}{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}} \quad (2.42)$$

Новое положения уровня энергии $\tilde{\varepsilon}_d$ определяется после вычисления примесных чисел заполнения n_d из системы уравнений (2.35), (2.40)-(2.42). Далее в выражении (2.34) производится замена величины ε_d на величину $\tilde{\varepsilon}_d$.

На рисунке **2.14** показаны результаты расчета локальной туннельной проводимости для случая мелкой примеси. Результаты расчета, проведенного для случая, когда зонд СТМ расположен непосредственно над примесным атомом, демонстрируют, что форма линии локальной туннельной проводимости имеет вид Фано резонанса как при наличии (черная кривая), так и при отсутствии кулоновского взаимодействия (серая кривая) (рис. **2.14а**). Возникновение такой формы линии является следствием интерференции между двумя каналами туннелирования - прямым туннелированием между состояниями непрерывного спектра и резонансным туннелированием через примесный атом. Результаты расчета, проведенного без учета кулоновского взаимодействия, демонстрируют формирование резонансного провала при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$). Учет кулоновского взаимодействия приводит к сдвигу резонансного провала в область высоких напряжений смещения на туннельном контакте. С увеличением расстояния от примесного атома также наблюдается сдвиг резонансной особенности, кроме того происходит уширение провала (рис. **2.14б**, черная кривая). Уширение провала вызвано изменением положения уровня энергии из-за наличия кулоновского взаимодействия в системе и роста величин скоростей релаксации. С ростом расстояния от примесного атома (рис. **2.14в**, черная кривая) происходит исчезновение резонансного провала при наличии кулоновского взаимодей-

ствия в отличие от случая, когда кулоновское взаимодействия отсутствует (рис.2.14в, серая кривая).

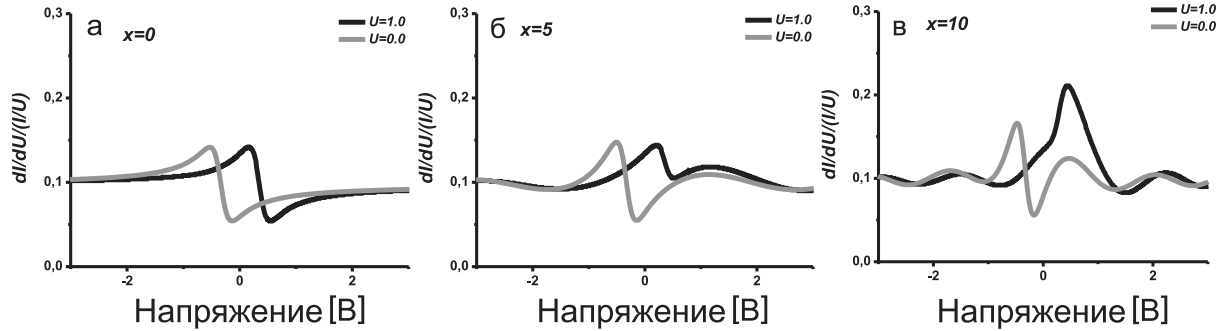


Рис. 2.14. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте для случая мелкой примеси, рассчитанная для различных значений расстояния от примеси x в отсутствие (серая линия) и при наличии (черная линия) кулоновского взаимодействия U . Значения параметров $a = 1$, $t = 0,22$, $T = 0,18$, $\tau = 0,40$, $\Im = 1,00$, $\varepsilon_d = -0,15$, $U = 1,00$, $\nu_k^0 = 1$ одинаковы для всех графиков.

Таким образом, в данном параграфе исследованы характерные особенности, возникающие в локальной проводимости туннельной системы с примесным атомом в результате конкуренции двух процессов: кулоновского взаимодействия и квантовой интерференции, связанной с наличием нескольких каналов для транспорта электронов через зарядовые локализованные состояния, образованные примесными атомами. Исследован электронный туннельный транспорт через глубокую и мелкую примеси. Показано, что типичная асимметричная форма особенностей, рассчитанных в случае, когда зонд СТМ расположен над примесным атомом, определяется эффектами интерференции, связанными с наличием резонансного и прямого каналов для туннелирования электронов. Следовательно, проводя измерения туннельной проводимости над примесным атомом, можно определить, каким образом происходит транспорт электронов в системе. Исследуя эволюцию особенностей в локальной проводимости при изменении расстояния от примесного атома можно сделать вывод о наличии или отсутствии кулоновского взаимодействия в системе и оценить его величину. Предложенная модель в совокупности с экспериментальными данными, полученными методом СТМ/СТС, позволяет более точно определять глубину залегания примесных атомов в полупроводниковой матрице.

§ 2.5. Влияние перенормировки туннельных матричных элементов за счет кулоновского взаимодействия на локальную туннельную проводимость

Кулоновское взаимодействие приводит не только к изменению положения уровня энергии при туннелировании через локализованное состояние, образованное примесным атомом [270, 271]. Другой эффект, который необходимо учитывать при анализе результатов измерения локальной туннельной проводимости в окрестности примесного атома одновременно с эффектом сдвига положения уровня энергии, связан с влиянием кулоновского взаимодействия на перенормировку туннельных матричных элементов [272]. Рассмотрим процессы резонансного туннелирования между поверхностью полупроводника и острием зонда СТМ через глубокую и мелкую примеси при наличии в системе кулоновского взаимодействия. Исследуем случай, когда зонд СТМ расположен точно над примесным атомом.

При наличии кулоновского взаимодействия, гамильтониан системы \hat{H} может быть записан в виде:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{tun} \\ \hat{H}_0 &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + h.c. \\ \hat{H}_{tun} &= \sum_{k\sigma} t_{kd} c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{pd} c_{d\sigma}^+ c_{p\sigma} + h.c. \\ \hat{H}_{imp} &= \sum_{d\sigma} \varepsilon_d c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma} + U n_{d\sigma} n_{d-\sigma}\end{aligned}\quad (2.43)$$

Индексы k и p описывают состояния непрерывного спектра полупроводника и острия зонда СТМ соответственно. Индекс d соответствует электронным состояниям примеси. U - величина кулоновского взаимодействия локализованных электронов; $n_{d\sigma} = c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma}$, $c_{d\sigma}$ - оператор уничтожения электронов в локализованном состоянии на примеси со спином σ . Гамильтониан \hat{H}_0 описывает состояния непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Туннельный гамильтониан \hat{H}_{tun} описывает резонансное туннелирование между состояниями непрерывного спектра через примесное состояние. Оператор \hat{H}_{imp} описывает электроны, локализованные на примеси. t_{kd} и t_{pd} - амплитуды прямого туннелирования между берегами туннельного контакта и примесным атомом.

Как и при исследовании влияния кулоновского взаимодействия на положение уровней энергии примесного атома, рассмотренного в предыдущем разделе, при анализе глубокой примеси будем использовать приближение Хаббард-I. В этом случае запаздывающая примесная функция Грина определяется выражением (2.38), а выражение для локальной туннельной проводимости имеет вид [272]:

$$\frac{dI}{dV}(\omega) = \frac{\gamma_{kd}\gamma_{pd}}{\gamma_{kd} + \gamma_{pd}} \text{Im}G_{dd}^{R\sigma}(\omega) \quad (2.44)$$

Для учета изменения амплитуд матричных элементов, вызванных кулоновским взаимодействием локализованных электронов, необходимо модифицировать часть исходного гамильтониана системы (2.43), отвечающую за описание процессов туннелирования между берегами туннельного контакта через примесь. Кулоновское взаимодействие локализованных электронов приводит к смещению уровней энергии примеси. При этом, в зависимости от того становится уровень более глубоким или менее глубоким, происходит эффективное изменение ширины туннельного барьера, и амплитуда туннелирования перестает быть постоянной величиной. С увеличением числа заполнения электронов уровень становится более мелким и амплитуда туннелирования уменьшается. Таким образом, более мелкому уровню соответствует меньшая величина амплитуды туннелирования, а сама величина туннельной амплитуды зависит от наличия или отсутствия на энергетическом уровне электронов. Тогда, обычно полагаемую постоянной амплитуду туннелирования можно представить в виде суммы двух слагаемых, учитывая, что амплитуда различается для случаев, когда электрон туннелирует на свободный примесный уровень и на уровень, который уже занят другим электроном. Эффективный гамильтониан будет иметь следующий вид:

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k\sigma} t_{kd}^{eff} c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + \sum_{p\sigma} t_{pd}^{eff} c_{d\sigma}^+ c_{p\sigma} + h.c. \quad (2.45)$$

где выражения для амплитуд t_{kd}^{eff} и t_{pd}^{eff} представим в виде суммы двух вкладов:

$$t_{kd}^{eff} = T_1(1 - \langle n_{d-\sigma} \rangle) + T_2 \langle n_{d-\sigma} \rangle$$

$$t_{pd}^{eff} = t_1(1 - \langle n_{d-\sigma} \rangle) + t_2 \langle n_{d-\sigma} \rangle \quad (2.46)$$

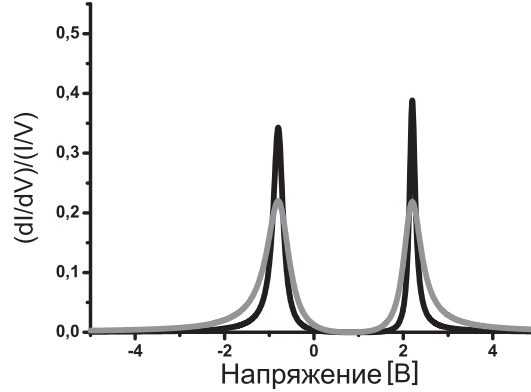


Рис. 2.15. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте для случая глубокой примеси при наличии кулоновского взаимодействия. Серая кривая получена для случая, когда туннельные амплитуды зависят от чисел заполнения $t_1 = 0,20$, $t_2 = 0,29$, $T_1 = 0,30$, $T_2 = 0,35$. Черная кривая соответствует расчетам, проведенным для случая, когда амплитуды туннельных переходов имеют постоянные значения $t_{kd} = 0,35$, $t_{pd} = 0,29$. Значения параметров $\varepsilon_d = -0,80$, $U = 3,00$ одинаковы для всех графиков.

В случае, когда туннелирование происходит через пустой примесный уровень, амплитуды туннелирования описываются величинами t_1 и T_1 . Если туннелирование происходит через уровень, на котором находится электрон с заданным направлением спина, амплитуды туннельных переходов описываются величинами t_2 и T_2 . Для расчета локальной туннельной проводимости можно использовать выражения (2.35) и (2.44), в которых произведены замены $t_{kd} \rightarrow t_{kd}^{eff}$ и $t_{pd} \rightarrow t_{pd}^{eff}$. Результаты расчета туннельной проводимости для случая глубокого примесного уровня на основе самосогласованной системы уравнений приведены на рисунке 2.15. Полученные зависимости демонстрируют образование двух пиков в туннельной проводимости. Положение первого пика соответствует величине напряжения, совпадающей с энергией уровня примесного атома ($\omega = \varepsilon_d$), а положение второго пика соответствует величине напряжения, совпадающего с энергией уровня примесного атома, сдвинутой на величину кулоновского взаимодействия ($\omega = \varepsilon_d + U$). Учет зависимости амплитуд туннельных переходов от неравновесных чисел заполнения приводит к значительному уменьшению амплитуд резонансных пиков, по сравнению с результатами расчетов для случая, когда перенормировка туннельных амплитуд не производилась. Кроме того, происходит существенное уширение пиков. Необходи-

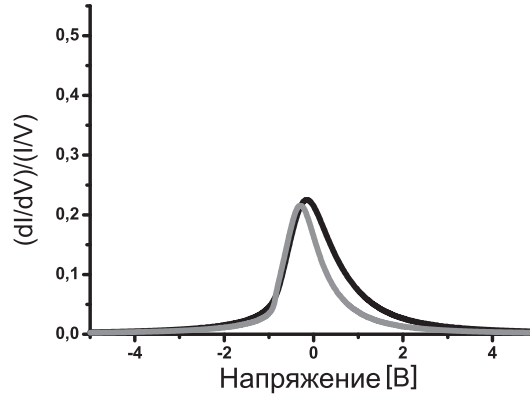


Рис. 2.16. Зависимость локальной туннельной проводимости от напряжения на туннельном контакте для случая мелкой примеси при наличии кулоновского взаимодействия. Серая кривая получена для случая, когда туннельные амплитуды зависят от чисел заполнения $t_1 = 0,40$, $t_2 = 0,49$, $T_1 = 0,60$, $T_2 = 0,68$. Черная кривая соответствует расчетам для случая, когда амплитуды туннельных переходов имеют постоянные значения $t_{kd} = 0,68$, $t_{pd} = 0,49$. Значения параметров $\varepsilon_d = -0,15$, $U = 3,00$ одинаковы для всех графиков.

мо заметить, что в обоих случаях был учтен эффект изменения положения уровней энергии за счет кулоновского взаимодействия локализованных электронов.

Теперь рассмотрим случай мелкой примеси, когда уровень энергии расположен в окрестности уровня Ферми. Применяя для описания учета кулоновского взаимодействия в системе метод среднего поля и используя выражение (2.41) для нахождения нового положения энергетического уровня, а также проводя следующие замены $t_{kd} \rightarrow t_{kd}^{eff}$ и $t_{pd} \rightarrow t_{pd}^{eff}$ в выражении для запаздывающей функции Грина локализованных электронов $G_{dd}^{R\sigma}(\omega)$, получим систему самосогласованных уравнений. Решая систему уравнений самосогласованным образом аналогично тому, как это было сделано в предыдущем параграфе, получим результаты, представленные на рисунке **2.16**.

Учет влияния неравновесных чисел заполнения на величины туннельных амплитуд в случае мелкой примеси приводит к незначительному уменьшению амплитуды резонансного пика, при этом сам пик становится более узким по сравнению со случаем, когда туннельные амплитуды полагаются постоянными величинами. Кроме того, наблюдается дополнительный сдвиг резонансного пика.

§ 2.6. Влияние потенциала доменной стенки, на локальную плотность поверхностных состояний

Одним из наиболее часто встречающихся на поверхностях полупроводников дефектов является доменная стенка [104–106]. Наличие доменной стенки приводит к значительному перераспределению электронной плотности поверхностных состояний. Исследуем влияние потенциала доменной стенки на поверхности полупроводника, на локальную плотность поверхностных состояний. Для этого рассмотрим модель двумерной решетки, состоящей из двух различных видов атомов с уровнями энергии ε_1 и ε_2 соответственно, амплитуды переходов между атомами соседних узлов вдоль каждой из атомных цепочек также будем полагать различными и равными t и T . Взаимодействие между атомами соседних цепочек будем описывать амплитудой перехода τ , которая имеет одно и тоже значение для всех атомов в цепочке, такое предположение связано с достаточно большим расстоянием между соседними цепочками. Расстояние между атомами вдоль цепочки будем считать равным a , а между атомами соседних цепочек — b (рис. 2.17).

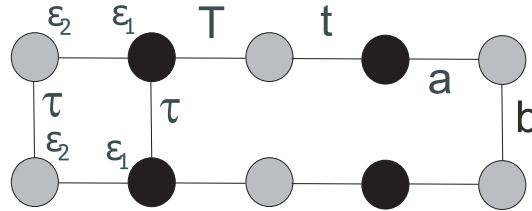


Рис. 2.17. Модель двумерной атомной решетки, состоящей из двух различных видов атомов.

Представленная модель может быть описана с помощью гамильтониана

$$\hat{H} = \sum_{i=1,2} \varepsilon_i c_i^+ c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} t c_i^+ c_j + \sum_{\langle i,j \rangle} T c_j^+ c_i + \sum_{\langle k,l \rangle} \tau c_k^+ c_l + h.c. \quad (2.47)$$

Который соответствует двумерной атомной решетке с переходами между соседними узлами. Операторы $c_{k/l}^+/c_{k/l}$ и $c_{i/j}^+/c_{i/j}$ соответствуют рождению/уничтожению электронов в узлах решетки. Индексы i, j относятся к направлению вдоль атомных цепочек, а индексы k, l описывают направление перпендикулярное атомным цепочкам.

Положим сначала $\tau = 0$ и рассмотрим одномерную атомную цепочку, состоящую из атомов двух типов без учета взаимодействия с соседними цепочками ($\tau = 0$). Функции Грина внутри одной элементарной ячейки, необходимые для расчета плотности состояний, можно вычислить, используя уравнения Дайсона. После Фурье-преобразования уравнения будут иметь вид:

$$\begin{aligned} G_{11}^R(\omega, \kappa_x) &= G_{11}^{0R}(\omega) + G_{11}^{0R}(\omega)\xi(\kappa_x)G_{21}^R(\omega, \kappa_x) \\ G_{21}^R(\omega, \kappa_x) &= G_{22}^{0R}(\omega) + G_{22}^{0R}(\omega)\xi^*(\kappa_x)G_{11}^R(\omega, \kappa_x) \end{aligned} \quad (2.48)$$

где

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R} &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_1} & \xi(\kappa_x) &= \sum t e^{i\kappa_x a} + T e^{-i\kappa_x a} \\ G_{22}^{0R} &= \frac{1}{\omega - \varepsilon_2} & \xi^*(\kappa_x) &= \sum t e^{-i\kappa_x a} + T e^{i\kappa_x a} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Таким образом, функции Грина атомной цепочки имеют вид:

$$\begin{aligned} G_{11}^R(\omega, \kappa_x) &= \frac{G_{22}^{0R-1}(\omega) - \xi(\kappa_x)}{G_{11}^{0R-1}(\omega) \cdot G_{22}^{0R-1}(\omega) - \varepsilon(\kappa_x)} \\ G_{22}^R(\omega, \kappa_x) &= \frac{G_{11}^{0R-1}(\omega) - \xi^*(\kappa_x)}{G_{11}^{0R-1}(\omega) \cdot G_{22}^{0R-1}(\omega) - \varepsilon(\kappa_x)} \end{aligned} \quad (2.50)$$

где $\varepsilon(\kappa_x) = |\xi(\kappa_x)|^2 = t^2 + T^2 + 2tT \cos(2\kappa_x a)$.

После суммирования по k_x и взятия мнимой части от функций Грина, мы получим выражение для плотности состояний, рассчитанной внутри элементарной ячейки над атомом с уровнем энергии ε_1 .

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \cdot \frac{\omega - \varepsilon_2 - (t + T)\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{4tT} \cdot (\omega^2 - \omega(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \varepsilon_1\varepsilon_2 - t^2 - T^2)}}{2atT\sqrt{1 - \frac{1}{4t^2T^2} \cdot (\omega^2 - \omega(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + \varepsilon_1\varepsilon_2 - t^2 - T^2)^2}} \quad (2.51)$$

Очевидно, что при выполнении каждого из условий по отдельности: значения энергий уровней атомов в решетке различны $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$ и различны значения амплитуд переходов между соседними узлами решетки $t \neq T$ или,

когда выполнены оба условия, существует две разрешенные зоны в плотности состояний. Ширины зон и расположение их границ определяются неравенствами.

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t + T)^2}}{2} < \omega < \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t - T)^2}}{2} \\ \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t - T)^2}}{2} < \omega < \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t + T)^2}}{2} \end{aligned} \quad (2.52)$$

Ширина запрещенной зоны может быть определена из выражения:

$$E_g = \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4 \cdot (t - T)^2} \quad (2.53)$$

В случае, если равны значения величин энергий уровней атомов решетки $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ и равны значения амплитуд переходов между соседними узлами решетки $t = T$ существует только одна зона.

Теперь рассмотрим эффекты, связанные со взаимодействием между цепочками на поверхности полупроводника. В этом случае функции Грина будут зависеть от двух волновых векторов k_x и k_y .

Функции Грина внутри элементарной ячейки, аналогично случаю для одномерной невзаимодействующей атомной цепочки, можно вычислить с помощью уравнений Дайсона, но вместо нулевых функций Грина G_{11}^{0R} и G_{22}^{0R} будем использовать в уравнениях функции $G_{11}^R(k_x)$ и $G_{22}^R(k_x)$, которые были найдены для одной изолированной одномерной цепочки ($\tau = 0$). После Фурье-преобразования получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} G_{11}^R(\omega, \kappa_x, \kappa_y) &= \frac{\omega - \varepsilon_2 - \xi(\kappa_x)}{(\omega - \varepsilon_2)(\omega - \varepsilon_1) - \varepsilon(\kappa_x) - (\omega - \varepsilon_2 - \xi(\kappa_x))2\tau \cos \kappa_y b + i\gamma} \\ G_{22}^R(\omega, \kappa_x, \kappa_y) &= \frac{\omega - \varepsilon_1 - \xi^*(\kappa_x)}{(\omega - \varepsilon_2)(\omega - \varepsilon_1) - \varepsilon(\kappa_x) - (\omega - \varepsilon_2 - \xi(\kappa_x))2\tau \cos \kappa_y b + i\gamma} \end{aligned} \quad (2.54)$$

где $\xi(\kappa_x) = (T e^{2i\kappa_x a} + t)/e^{i\kappa_x a}$.

Спектр поверхностных состояний определяется выражениями:

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + 2\tau \cos(\kappa_y b) \pm \sqrt{D}}{2}$$

$$D = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t^2 + T^2 + 2tT \cos(2\kappa_x)a) + \\ + 4\tau \cos(\kappa_y b)(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \tau \cos(\kappa_y b) - 2(t + T) \cos(\kappa_x)a) \quad (2.55)$$

Выражение, описывающее ширину запрещенной зоны, имеет вид:

$$E_g = -\tau + \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4(t - T)^2 + 4\tau(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \tau + 2(t - T))} \quad (2.56)$$

Если значения величин энергий уровней атомов в решетке различны $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$, или различны значения амплитуд переходов в решетке $t \neq T \neq \tau$, то в спектре поверхностных состояний атомной решетки существуют две разрешенные зоны.

Исследуем влияние на локальную плотность поверхностных состояний возмущающего потенциала, связанного с наличием на поверхности полупроводника доменной стенки. Пусть доменная стенка ориентирована на поверхности произвольным образом по отношению к направлению атомных цепочек. Тогда введем угол между направлением доменной стенки на поверхности и атомными рядами и обозначим его φ .

Влияние потенциала доменной стенки на локальную плотность поверхностных состояний представляется наиболее интересным в направлении перпендикулярном доменной стенке [104,105]. С целью упрощения расчетов матричных элементов сделаем поворот системы координат на угол φ и перейдем от системы (x', y') к системе (x, y) . В новой системе координат положение доменной стенки будет совпадать с осью ординат, и волновые вектора будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \kappa_x &= \kappa'_x \cos(\varphi) + \kappa'_y \sin(\varphi) \\ \kappa_y &= -\kappa'_x \sin(\varphi) + \kappa'_y \cos(\varphi) \end{aligned} \quad (2.57)$$

Тогда потенциал, создаваемый доменной стенкой можно записать в виде $\hat{W} = \tilde{W} \delta_{kx1, kx2} \delta_y$. Уравнение Дайсона и выражение для функции Грина $\hat{G}^R(\vec{k}, \vec{\kappa}_1, \omega)$, определяющей локальную плотность поверхностных состояний в присутствии доменной стенки, наиболее компактным образом можно записать в матричной форме:

$$\hat{G}^R(\vec{k}, \vec{\kappa}_1, \omega) = \hat{G}^{0R}(\vec{k}, \vec{\kappa}_1, \omega) + \sum_{\kappa_{x2}, \kappa_{y2}} \hat{G}^{0R}(\vec{k}, \vec{\kappa}_1, \omega) \hat{W} \hat{G}^R(\vec{\kappa}_1, \vec{\kappa}_2, \omega) \quad (2.58)$$

$$\hat{G}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) = \begin{pmatrix} G_{11}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) & G_{12}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) \\ G_{21}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) & G_{22}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} \tilde{W} & 0 \\ 0 & \tilde{W} \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

$$\hat{G}^R(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) = \begin{pmatrix} G_{11}^R(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) & G_{12}^R(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) \\ G_{21}^R(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) & G_{22}^R(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega) \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

где $\vec{\kappa} = (\kappa_x, \kappa_y)$, $\vec{\kappa}_1 = (\kappa_{x1}, \kappa_{y1})$ и $\vec{\kappa}_2 = (\kappa_{x2}, \kappa_{y2})$. Функция Грина $G_{11}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega)$ в точности равна функции Грина $G_{11}^R(\kappa_x, \kappa_y, \omega)$, а функция Грина $G_{22}^{0R}(\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1, \omega)$ функции $G_{22}^R(\kappa_x, \kappa_y, \omega)$, которые описывают плотность состояний двумерной атомной решетки без учета потенциала доменной стенки.

Зависимость локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении, перпендикулярном доменной стенке определяется выражением:

$$\rho(\omega, \vec{r}) = \frac{-1}{\pi} \text{Im} \sum_{\vec{\kappa}, \vec{\kappa}_1} G_{\vec{\kappa}\vec{\kappa}_1}^R(\omega) e^{i\vec{\kappa}\vec{r}} e^{-i\vec{\kappa}_1\vec{r}} \quad (2.62)$$

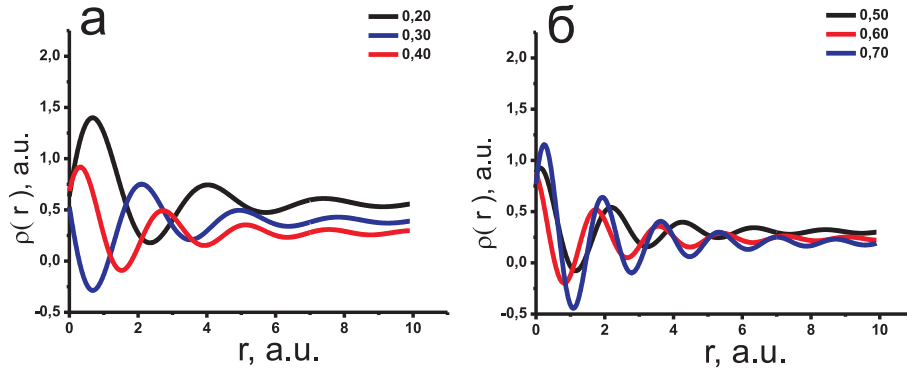


Рис. 2.18. Зависимости локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке на поверхности полупроводника для значений энергии, соответствующих поверхностной запрещенной зоне. $a = 1$, $b = 6, 9$, $t = 1, 5$, $T = 1, 2$, $\tau = 0, 3$, $\varepsilon_1 = -0, 2$, $\varepsilon_2 = 0, 6$.

Типичные зависимости плотности состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке при значениях энергии, соответствующих запрещенной зоне поверхностных состояний, представлены на рис. 2.18.

Представленные на рис. 2.18 результаты численных расчетов демонстрируют, что зависимость локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке для значений энергии, соответствующих поверхностной запрещенной зоне, имеет вид экспоненциально спадающих осцилляций, с типичным масштабом затухания порядка (3–5) периодов атомной решетки в направлении перпендикулярном атомным цепочкам. Период осцилляций уменьшается с увеличением напряжения, приложенного к туннельному контакту.

На рис. 2.19 приведены результаты расчетов для случаев, когда поверхностные состояния локализованы в разрешенных зонах (валентной зоне и зоне проводимости). В этом случае зависимости локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке также имеют вид экспоненциально спадающих осцилляций, но при этом образуются дополнительные осцилляции и шумы, которые с увеличением значения напряжения на туннельном контакте приводят к полному исчезновению периодического вида зависимости локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке.

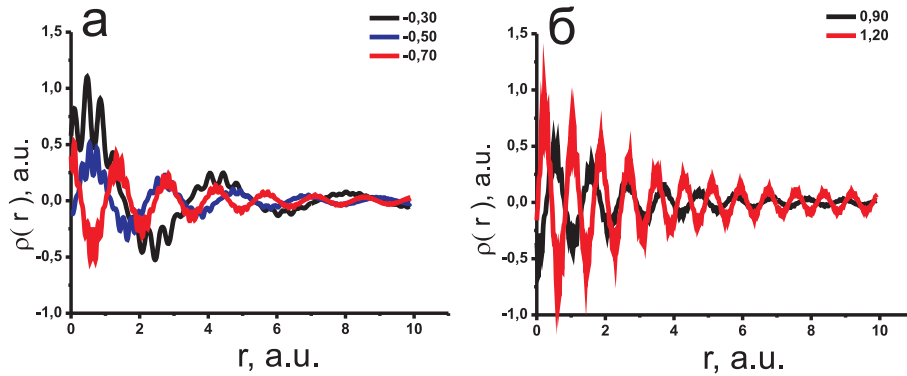


Рис. 2.19. Зависимости локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном доменной стенке на поверхности полупроводника для значений энергии, соответствующих а) валентной зоне б) зоне проводимости. $a = 1$, $b = 6, 9$, $t = 1, 5$, $T = 1, 2$, $\tau = 0, 3$, $\varepsilon_1 = -0, 2$, $\varepsilon_2 = 0, 6$.

Таким образом, продемонстрировано, что наличие на поверхности полупроводника одномерного дефекта, приводит к осциллирующему виду зависимости локальной плотности состояний от расстояния в направлении перпендикулярном дефекту. Осцилляции локальной плотности наблюдаются для напряжений на туннельном контакте, соответствующих поверхностной запрещенной зоне. Проанализирована зависимость периода осцил-

ляций от значения напряжения на туннельном контакте.

В частности исследовано наблюдаемое в эксперименте уменьшение периода осцилляций в локальной плотности состояний при увеличении значения напряжения на туннельном контакте на поверхности Si (100) и Ge (100) [104, 105, 269].

Кроме того, предложенная модель позволила объяснить, обнаруженные впервые в работе [269] особенности локальной плотности поверхностных состояний в окрестности доменной стенки.

§ 2.7. Выводы

Продемонстрирована определяющая роль локализованных состояний, образованных индивидуальными примесными атомами, в формировании особенностей туннельных характеристик в системах с пониженной размерностью и в структурах с характерными размерами сравнимыми с радиусом локализации одиночных примесей в широком диапазоне напряжений смещения на туннельном контакте. Предложен теоретический подход, который позволяет исследовать характерный вид особенностей пространственного распределения локальной электронной плотности в окрестности поверхностных локализованных состояний, образованных отдельными глубокими и мелкими примесными атомами с учетом кулоновского взаимодействия при существовании нескольких каналов для туннелирования электронов. Данный подход позволяет по виду спектров локальной туннельной проводимости определить каким образом происходит транспорт электронов через систему сверхмалых размеров и какова роль кулоновского взаимодействия в формировании кинетических характеристик исследуемой системы. В частности:

1. Показано, что учет изменений в локальной плотности состояний непрерывного спектра, связанных с наличием примесного атома, приводит к формированию провала в локальной туннельной проводимости, рассчитанной над примесным атомом, при напряжении, совпадающем с энергией уровня примесного атома.
2. Объяснено "включение" (пик) и "выключение" (провал) примесного атома в туннельной проводимости, измеряемой в экспериментах по исследованию локальной туннельной проводимости методом

СТМ/СТС [83, 274, 275], при изменении расстояния от примеси.

3. Продемонстрировано, что при наличии двух каналов туннелирования: прямого туннелирования между состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта и резонансного туннелирования через примесный атом, в локальной туннельной проводимости происходит формирование Фано резонансов, обусловленное интерференцией двух каналов туннелирования.
4. Исследовано влияние кулоновского взаимодействия электронов, локализованных на глубокой и мелкой примеси, на вид локальной туннельной проводимости. Продемонстрировано, что кулоновское взаимодействие локализованных электронов приводит к:
 - изменению местоположения резонансных особенностей на шкале напряжений смещения на туннельном контакте.
 - модификации формы и ширины линии резонансных особенностей.
5. Продемонстрировано, что наличие на поверхности полупроводника возмущающего потенциала, связанного с одномерными дефектами на поверхности, приводит к осциллирующему виду зависимости локальной плотности поверхностных состояний от расстояния в направлении перпендикулярном одномерному дефекту.

С помощью предложенной модели объяснено наблюдаемое в эксперименте уменьшение периода осцилляций в локальной плотности состояний при увеличении напряжения на туннельном контакте на поверхности Si (100) и Ge (100) [104, 105, 269]. Кроме того, предложенная модель позволила объяснить, обнаруженные впервые в работе [269] особенности локальной плотности поверхностных состояний в окрестности доменной стенки.

ГЛАВА 3

Теоретическое исследование спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне частот при туннелировании через зарядовые локализованные состояния

§ 3.1. Формирование низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании электронов через одно зарядовое локализованное состояние

Фундаментальным ограничением, определяющим параметры электронного транспорта в твердотельных наноструктурах, является фликкер шум (шум со спектром $1/f^\alpha$) [4, 5]. Уменьшение размеров базовых элементов, необходимое для увеличения скорости передачи и плотности записи информации, ограничено увеличением низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$. Возрастание уровня шума приводит к ухудшению характеристик не только обычных транзисторов, но и значительно ограничивает свойства таких элементов как вибраторы, излучатели, аналоговые преобразователи, микросенсоры и генераторы в связи с уменьшением отношения сигнал/шум. Поэтому, важным является вопрос об установлении микроскопической природы низкочастотного шума и о механизмах воздействия на шум со спектром $1/f^\alpha$ с целью его подавления [36, 38, 48]. Кроме того, в настоящее время показана возможность использования свойств низкочастотного шума для получения информации о химических свойствах исследуемой поверхности [30, 31].

Исследовать микроскопическую природу низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$ можно на основе результатов измерений, получаемых методом СТМ/СТС - одним из наиболее распространенных и совершенных методов для изучения кинетических и статистических характеристик систем, образованных примесными атомами и низкоразмерными полупроводниковыми структурами [76, 77]. Для анализа экспериментальных дан-

ных необходимо разработать теоретическую модель, позволяющую объяснить на микроскопическом уровне сингулярное поведение низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока, измеренной в окрестности примесных атомов на поверхности полупроводников [276–279]. Необходимо, чтобы предложенная теоретическая модель позволяла анализировать спектры туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте, что позволит применять ее для диагностики типов и зарядовых состояний примесных атомов, а также исследовать механизмы электронного транспорта в системах сверхмалых размеров.

Величина показателя степени низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока α определяется зарядовыми состояниями примесного атома и локализованного состояния на острие зонда сканирующего туннельного микроскопа [276, 277]. При описании процессов туннелирования через зарядовые локализованные состояния в области туннельного контакта необходимо учитывать релаксацию электронной плотности и перенормировку спектра за счет взаимодействия с электронными состояниями в берегах контакта. Следовательно, невозможно описание процессов туннелирования, основанное на использовании равновесной функции распределения туннелирующих частиц.

Описать туннельные процессы можно с использованием диаграммной техники для неравновесных процессов, позволяющей самосогласованным образом учесть и перенормировку исходного спектра системы за счет туннельных процессов и релаксацию неравновесных частиц [67]. Использование диаграммной техники для неравновесных процессов дает возможность описывать кинетику туннельных процессов и самосогласованным образом определять изменение спектра и плотности состояний исследуемой системы за счет различных типов взаимодействия.

Рассмотрим процесс резонансного туннелирования через промежуточное зарядовое локализованное состояние на острие зонда СТМ ($\varepsilon_d = eV$) [278]. Локализованное состояние в этом случае образовано группой атомов или единичным атомом ближайшим к поверхности на острие зонда СТМ [280, 281]. Такая модель соответствует спектрам туннельного тока экспериментально измеренным над чистой поверхностью полупроводника вдали от примесных атомов. Диаграмма туннельных переходов для этого случая представлена на рис. 3.1.

Исследуем поведение модели в приближении свободных электронов

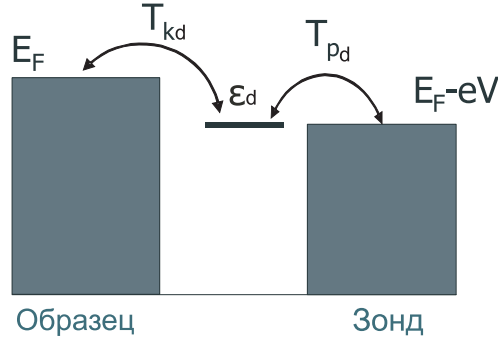


Рис. 3.1. Схематическое изображение модели туннелирования электронов через локализованное состояние. ε_d - энергия состояния, локализованного на острие зонда СТМ.

в берегах туннельного контакта. Амплитуда вероятности туннелирования (матричный элемент туннельного перехода) экспоненциально убывает с увеличением ширины туннельного барьера. Поэтому можно пренебречь прямыми туннельными переходами между состояниями в берегах контакта и рассматривать только туннелирование через локализованное состояние.

Представленная модель может быть описана с помощью гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{imp} + \hat{H}_{int} \quad (3.1)$$

в котором

$$\hat{H}_0 = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) c_k^+ c_k + \sum_p (\varepsilon_p - \mu - eV) c_p^+ c_p \quad (3.2)$$

описывает состояния непрерывного спектра в берегах контакта. Операторы c_k^+/c_k и c_p^+/c_p соответствуют рождению/уничтожению электронов в состояниях \mathbf{k} и \mathbf{p} в каждом из берегов контакта (\mathbf{k} , \mathbf{p} - левый и правый берега туннельного контакта соответственно). $\varepsilon_k/\varepsilon_p$ - энергии электронов в состояниях \mathbf{k} и \mathbf{p} в каждом из берегов контакта, μ -химический потенциал.

Оператор

$$\hat{H}_{imp} = \sum_d \varepsilon_d a_d^+ a_d \quad (3.3)$$

описывает локализованное состояние на острие зонда микроскопа. ε_d - энергия состояния, локализованного на острие зонда СТМ. Операторы a_d^+/a_d соответствуют рождению/уничтожению электронов в локализованном состоянии.

Туннельный гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,p,d} (T_{kd}c_k^+ a_d + T_{pd}c_p^+ a_d) + h.c. \quad (3.4)$$

и описывает процессы туннелирования электронов между берегами туннельного контакта через локализованное состояние. Гамильтониан взаимодействия \hat{H}_{int} включает в себя межчастичное взаимодействие, вызванное рассеянием электронов на потенциале зарядового локализованного состояния:

$$\hat{H}_{int} = W \sum_{k,p,d} (c_k^+ c_{k'} a_d a_d^+ + c_p^+ c_{p'} a_d a_d^+) + h.c. \quad (3.5)$$

Для обнаружения особенностей туннельных характеристик, вызванных локализованными состояниями, будем считать, что скорость релаксации неравновесных электронов в берегах туннельного контакта значительно превышает скорость туннельных переходов.

Для описания равновесных состояний в берегах туннельного контакта \mathbf{k} и \mathbf{p} будем использовать только функции Грина G_{kk}^{0-+} и G_{pp}^{0-+} , а все взаимодействия включим в примесную функцию Грина $G_{dd}^<$.

Тогда:

$$\begin{aligned} G_{kd}^< &= G_{kk}^{0R} T_{kd} G_{dd}^< + G_{kk}^{0<} T_{kd} G_{dd}^A \\ G_{dk}^< &= G_{dd}^R T_{kd} G_{kk}^{0<} + G_{dd}^< T_{kd} G_{kk}^{0A} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Аналогично:

$$\begin{aligned} G_{pd}^< &= G_{pp}^{0R} T_{pd} G_{dd}^< + G_{pp}^{0<} T_{pd} G_{dd}^A \\ G_{dp}^< &= G_{dd}^R T_{pd} G_{pp}^{0<} + G_{dd}^< T_{pd} G_{pp}^{0A} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Для функций Грина $G_{kk_1}^<$ и $G_{dd}^<$ имеем систему уравнений:

$$\begin{aligned} G_{kk_1}^< &= G_{kk_1}^{0<} + G_{kk}^{0R} T_{kd} G_{dk_1}^< + G_{kk}^{0<} T_{kd} G_{dk_1}^A \\ G_{dd}^< &= G_{dd}^{0<} + G_{dd}^{0<} T_{kd} G_{kd}^A + G_{dd}^{0R} T_{dk} G_{kd}^< + G_{dd}^{0<} T_{pd} G_{pd}^A + G_{dd}^{0R} T_{dp} G_{pd}^< \end{aligned} \quad (3.8)$$

Обозначим:

$$\sum_p T_{pd}^2 \text{Im} G_{pp}^{0R} = \gamma_p; \sum_k T_{kd}^2 \text{Im} G_{kk}^{0R} = \gamma_k \quad (3.9)$$

γ_p - скорость ухода электронов из локализованного на острие состояния в состояния непрерывного спектра острия СТМ. γ_k - скорость прихода электронов из состояний непрерывного спектра образца в локализованное состояние. Тогда для функции Грина локализованного состояния $G_{dd}^<$ можно получить:

$$G_{dd}^< = -2in_d(\omega) \text{Im} G_{dd}^R(\omega) \quad (3.10)$$

где $n_d(\omega) = \frac{\gamma_k n_k^0(\omega) + \gamma_p n_p^0(\omega)}{\gamma_k + \gamma_p}$ неравновесные числа заполнения в локализованном состоянии, $G_{dd}^R = \frac{1}{\omega - \varepsilon_d + i(\gamma_k + \gamma_p)}$ функция Грина локализованного состояния, а $n_k^0(\omega)$ и $n_p^0(\omega)$ - равновесные числа заполнения в берегах туннельного контакта.

Корреляционная функция туннельного тока, соответствующая переходам между локализованным состоянием и поверхностью полупроводника, над которой были проведены измерения спектров туннельного тока, может быть записана через операторы рождения и уничтожения и в нижнем порядке по T_{kd}^2 и T_{pd}^2 представима в виде:

$$\begin{aligned} (\hbar/e)^2 \cdot S(t, t') &= \langle I_L(t) \cdot I_L(t') \rangle - \langle I_L(t) \rangle^2 = \\ &= \sum_{k, k_1, d} T_{kd}^2 \langle c_k^+(t') a_d(t') a_d^+(t) c_{k_1}^+(t) \rangle \end{aligned} \quad (3.11)$$

где выражение для туннельного тока имеет вид:

$$I_L(t) = \sum_k \dot{n}_k \cdot e = \left(\sum_k c_k^+(t') a_d(t') T_{kd} - h.c. \right) \cdot \frac{e}{\hbar} \quad (3.12)$$

Спектральная плотность туннельного тока является результатом Фурье преобразования, совершенного над корреляционной функцией. Используя формализм диаграммной техники Келдыша, выражение для спектральной плотности без учета кулоновского взаимодействия между зарядовым локализованным состоянием и электронами в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта, можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
(\hbar/e)^2 \cdot S_0(\omega) = & T_{kd}^2 \cdot \sum_{k,k_1} (G_{kk_1}^<(\omega) \cdot G_{dd}^>(\omega + \omega') + G_{dd}^<(\omega) \cdot G_{kk_1}^>(\omega + \omega')) + \\
& + T_{kd}^2 \cdot \sum_{k,k_1} (G_{kd}^<(\omega) \cdot G_{k_1d}^>(\omega + \omega') + G_{k_1d}^<(\omega) \cdot G_{kd}^>(\omega + \omega')) \quad (3.13)
\end{aligned}$$

Выражение для спектральной плотности туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия определяется диаграммами, представленными на рис. 3.2.

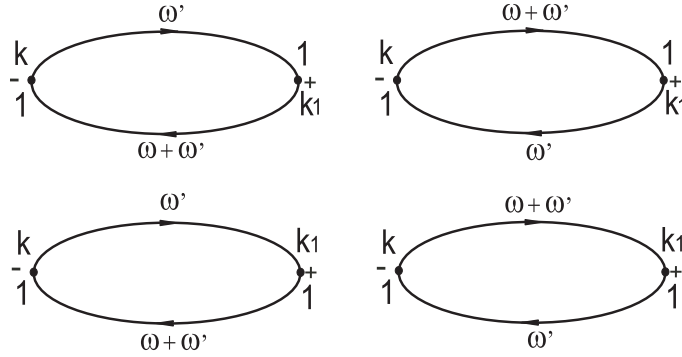


Рис. 3.2. Диаграммы, дающие вклад в спектральную плотность туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия.

После суммирования по k и k_1 спектральная плотность туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия имеет вид:

$$\begin{aligned}
S_0(\omega) = & (e/\hbar)^2 \cdot \gamma_k^2 \cdot \int d\omega' \text{Im}G_{dd}^R(\omega') \cdot \text{Im}G_{dd}^R(\omega + \omega') \cdot ((n_d(\omega + \omega') - 1) \cdot \\
& \cdot (n_d(\omega') - n_k(\omega')) + n_d(\omega') \cdot (n_d(\omega + \omega') - n_k(\omega + \omega'))) + \\
& + \gamma_k^2 \cdot \int d\omega' \text{Im}G_{dd}^R(\omega') \cdot \text{Im}G_{dd}^R(\omega + \omega') \cdot ((n_k(\omega + \omega') - 1) \cdot \\
& \cdot n_d(\omega') - n_d(\omega') \cdot (n_d(\omega + \omega') - 1) - n_k(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega') + \\
& + n_k(\omega') \cdot n_d(\omega + \omega')) + \gamma_k \cdot \int d\omega' (\text{Im}G_{dd}^R(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega') \cdot \\
& \cdot (n_d(\omega + \omega') - 1) + \text{Im}G_{dd}^R(\omega') \cdot n_d(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1)) = \\
= & (e/\hbar)^2 \cdot \tilde{S}_0 \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Полученное выражение позволяет выделить слагаемое пропорциональное туннельному току, которое обращается в ноль при абсолютном нуле температур и при отсутствии напряжения на туннельном контакте.

Используя явный вид для чисел заполнения локализованного состояния в туннельном контакте n_d и для запаздывающей функции Грина локализованного состояния G_{dd}^R , полагая при расчетах $eV = \varepsilon_d$, можно построить спектральные зависимости туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия между зарядовым локализованным состоянием и электронами в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта при различных значениях параметров туннельного контакта (рис. 3.3).

Представленные зависимости демонстрируют, что при стремлении частоты к нулю значение амплитуды низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине при различных значениях параметров туннельного перехода. Значение амплитуды спектральной плотности на нулевой частоте превосходит значения на частотах отличных от нуля, когда величины матричных элементов туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованным состоянием и берегами туннельного контакта оказываются одного порядка (γ_k порядка γ_p) (рис. 3.3 а, б) и в случае, когда скорость ухода электронов из локализованного состояния в состояния непрерывного спектра зонда СТМ превышает скорость прихода электронов в локализованное состояние из состояний непрерывного спектра полупроводника (рис. 3.3 г).

Если скорость прихода электронов в локализованное состояние превосходит скорость ухода электронов из локализованного состояния, то значение амплитуды спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте не является максимальным (рис. 3.3 в). С ростом частоты происходит уменьшение амплитуды спектральной плотности туннельного тока с последующим достижением минимального значения. При дальнейшем увеличении частоты наблюдается рост амплитуды, которая со временем достигает постоянного максимального значения. Наличие провала может быть связано с выполнением принципа Паули. При больших значениях скоростей прихода электронов в локализованное состояние происходит ограничение числа туннелирующих электронов. Наличие электрона с заданным спином в локализованном состоянии не позволяет второму электрону с такой же ориентацией спина протуннелировать через зарядовое локализованное состояние. Таким образом, уменьшается число носителей заряда и, следовательно, уменьшается значение амплитуды спектральной плотности туннельного тока.

Учтем эффект кулоновского взаимодействия между зарядовым лока-

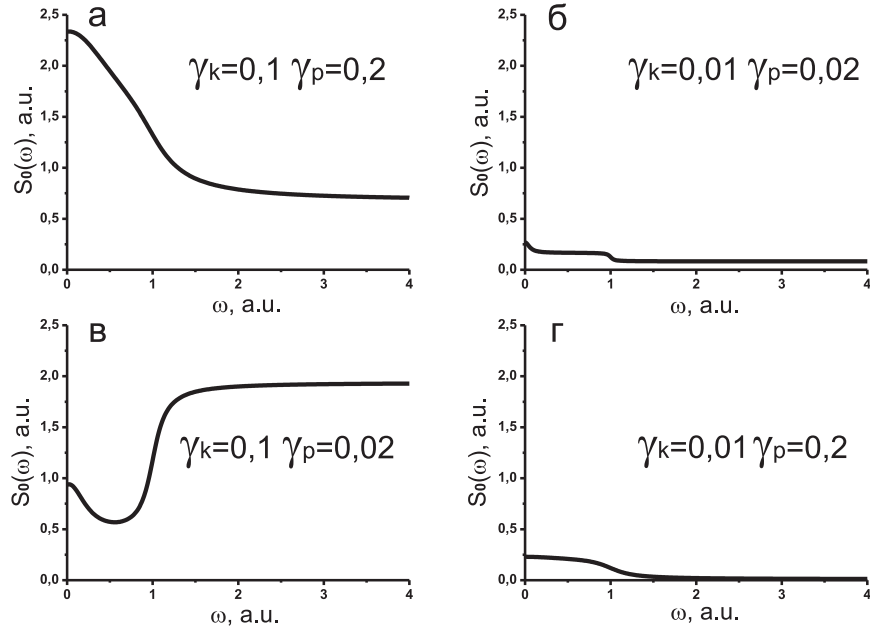


Рис. 3.3. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей переходов. $eV = \varepsilon_d = 1$.

лизованным состоянием и электронами в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Выражение для спектральной плотности туннельного тока при наличии кулоновского взаимодействия можно получить, проведя перенормировку амплитуд туннельных переходов из локализованного состояния на острие СТМ в состояния непрерывного спектра. Для этого необходимо перенормировать вершины диаграмм, представленных на рис. 3.2.

Вклад в спектральную плотность туннельного тока при учете кулоновского взаимодействия описывается двумя типами диаграмм (рис. 3.4 а,б и рис. 3.4 в,г):

1. Лестничные диаграммы (рис. 3.4 а,б) - наиболее простой вид диаграмм, дающих логарифмические поправки к амплитудам туннельного перехода. Лестничные диаграммы приводят к появлению логарифмической расходимости в спектре туннельного тока при резонансном туннелировании, когда величина напряжения смещения на туннельном контакте соответствует значению энергии уровня локализованного состояния.
2. Паркетные диаграммы (рис. 3.4 в,г) связаны с появлением нового типа петель, приводящих к логарифмической расходимости в спектре

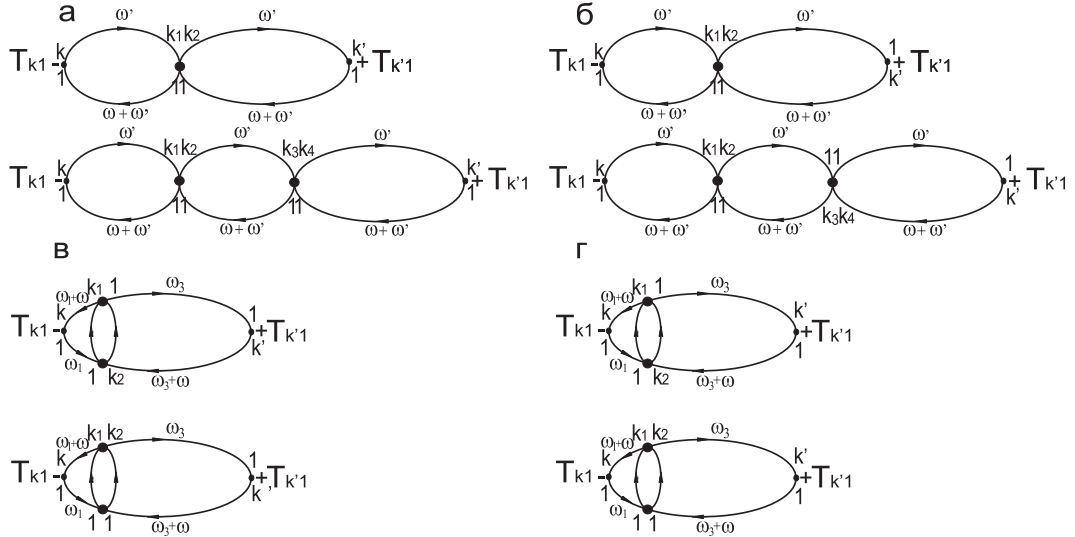


Рис. 3.4. Диаграммы низших порядков по кулоновскому взаимодействию, дающие вклад в спектральную плотность туннельного тока. Жирной точкой обозначено кулоновское взаимодействие. а)-б) лестничные диаграммы. в)-г) паркетные диаграммы.

туннельного тока при резонансном туннелировании и при значениях частоты, стремящихся к нулю. Паркетные диаграммы получаются в результате замены каждой жирной точки в лестничных диаграммах петель.

Выражение для спектральной плотности туннельного тока с учетом кулоновского взаимодействия между зарядовым локализованным состоянием и электронами проводимости в берегах туннельного контакта имеет вид:

$$\begin{aligned}
 (\hbar/e)^2 \cdot S(\omega) = & \tilde{S}_0(\omega) + \tilde{S}_0(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{(\omega + eV - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_k + \gamma_p)^2} \right)^{W\nu} + \right. \\
 & \left. + \left(\frac{D^2}{(-\omega + eV - \varepsilon_d)^2 + (\gamma_k + \gamma_p)^2} \right)^{W\nu} \right) \quad (3.15)
 \end{aligned}$$

где D - ширина разрешенной зоны состояний непрерывного спектра, ν - равновесная плотность состояний в берегах туннельного контакта, W - энергия кулоновского взаимодействия.

При резонансном туннелировании через локализованное состояние ($eV = \varepsilon_d$) выражение можно записать в более простом виде:

$$(\hbar/e)^2 \cdot S(\omega) = \tilde{S}_0(\omega) + \tilde{S}_0(\omega) \cdot \left(\frac{D^2}{\omega^2 + (\gamma_{k1} + \gamma_{p1})^2} \right)^{W\nu} \quad (3.16)$$

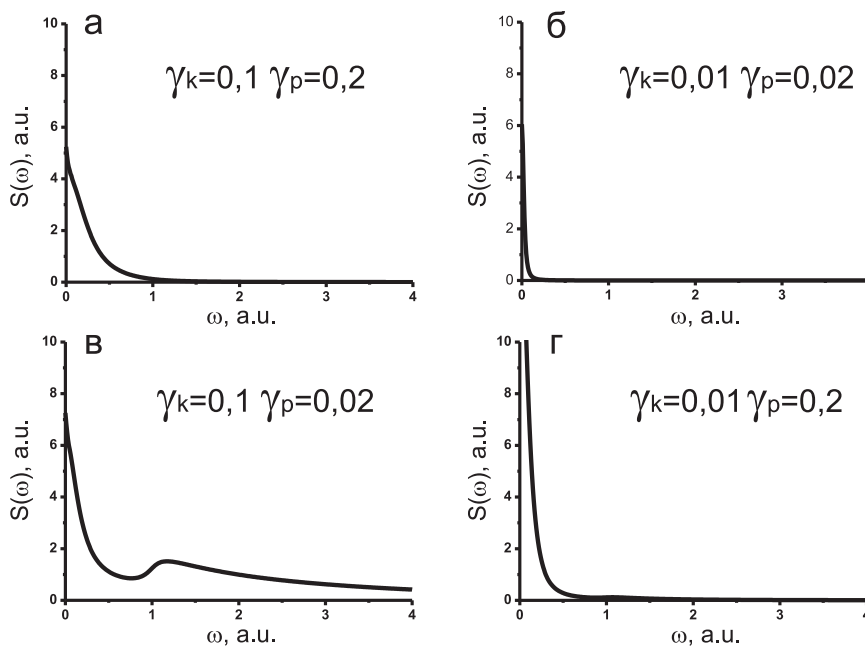


Рис. 3.5. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях параметров туннельного контакта. $eV = \varepsilon_d = 1$, $W = 0,6$.

Спектры туннельного тока, полученные при учете кулоновского взаимодействия при различных значениях параметров туннельного контакта, представлены на рис. 3.5. Полученные зависимости демонстрируют, что с уменьшением частоты происходит степенное возрастание амплитуды спектральной плотности туннельного тока. То есть, учет кулоновского взаимодействия приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока в окрестности нулевой частоты. Для случая, когда скорость прихода электронов в локализованное состояние из состояний непрерывного спектра полупроводника превышает скорость ухода электронов из локализованного состояния в состояния непрерывного спектра зонда СТМ, в спектральной плотности туннельного тока наблюдается провал, что соответствует провалу при том же значении частоты и тех же значениях скоростей переходов в туннельном контакте для спектральной зависимости в отсутствие перенормировки амплитуд туннельного перехода (рис. 3.5 в).

§ 3.2. Формирование низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании через два зарядовых локализованных состояния

Рассмотрим случай резонансного туннелирования через два зарядовых локализованных состояния, находящихся в туннельном контакте ($\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = eV$) [278]. Одно из локализованных состояний может быть образовано примесным атомом на поверхности, второе расположено на острие зонда СТМ [280, 281]. Будем рассматривать случай слабой связи между локализованными состояниями ($T < \gamma_{k1}, \gamma_{k2}, \gamma_p$). Учтем возможность прямого туннелирования электронов из локализованного состояния на острие зонда в состояния непрерывного спектра электронов образца (амплитуда туннельного перехода T_{k2}). Диаграмма туннельных переходов, возникающих в туннельном контакте, представлена на рис. 3.6.

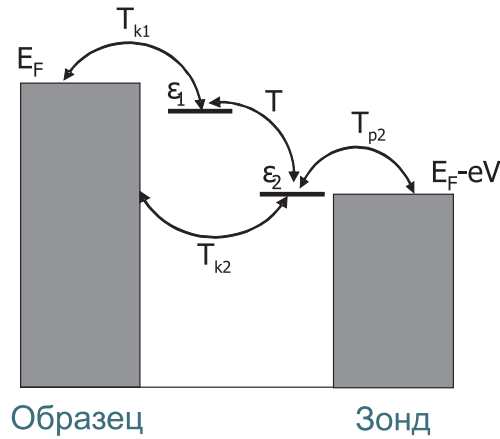


Рис. 3.6. Диаграмма туннельных переходов, возникающих в туннельном контакте при взаимодействии локализованного состояния, образованного примесным атомом, и локализованного состояния на острие зонда.

Описание эффектов туннелирования в такой системе основано на использовании гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{int} \quad (3.17)$$

в котором оператор

$$\hat{H}_0 = \sum_p (\varepsilon_p - eV) c_p^+ c_p + \sum_k \varepsilon_k c_k^+ c_k + \sum_{i=1,2} \varepsilon_i a_i^+ a_i \quad (3.18)$$

описывает свободные электроны проводимости в берегах контакта и в локализованных состояниях. Операторы c_k^+/c_k соответствуют рождению/уничтожению электронов в состояниях \mathbf{k} , c_p^+/c_p соответствуют рождению/уничтожению электронов в состояниях непрерывного спектра \mathbf{p} (\mathbf{k} , \mathbf{p} - левый и правый берега контакта соответственно). $\varepsilon_k/\varepsilon_p$ - энергии электронов в состояниях \mathbf{k} и \mathbf{p} в каждом из берегов контакта. ε_2 - энергия невозмущенного состояния, локализованного на острие зонда СТМ, ε_1 - энергия невозмущенного локализованного состояния, образованного примесным атомом. Операторы a_i^+/a_i соответствуют рождению/уничтожению электронов в локализованных состояниях (примесный атом, локализованное состояние на острие).

Гамильтониан взаимодействия

$$\hat{H}_{int} = \sum_{k,k'} W_1 c_k^+ c_{k'} a_1 a_1^+ + W_2 c_k^+ c_{k'} a_2 a_2^+ \quad (3.19)$$

учитывает процессы внутризонного рассеяния электронов на кулоновских потенциалах зарядовых локализованных состояний (W_2 - для локализованного состояния на острие, W_1 - для примесного атома). Гамильтониан

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{k,i} T_{ki} c_k^+ a_i + \sum_{p,i} T_{pi} c_p^+ a_i + T \sum a_1^+ a_2 + h.c. \quad (3.20)$$

описывает туннелирование между берегами контакта через промежуточные локализованные состояния.

Будем использовать приближение быстрой релаксации возмущенной электронной плотности в берегах туннельного контакта. То есть считаем, что числа заполнения для состояний непрерывного спектра в берегах контакта $n_k^0(\omega)$, $n_p^0(\omega)$ мало изменяются за счет туннельных процессов. Это значит, что функции Грина для состояний непрерывного спектра имеют вид:

$$\begin{aligned} G_{kk}^< &= -2in_k(\omega)ImG_{kk}^R(\omega) \\ G_{pp}^< &= -2in_p(\omega)ImG_{pp}^R(\omega) \end{aligned} \quad (3.21)$$

Проблема определения туннельных характеристик сводится к нахождению точных значений функций Грина примесных состояний. Используя

диаграммную технику Келдыша получим уравнения для функций Грина $G_{11}^<, G_{22}^<, G_{12}^<, G_{21}^<, G_{k1}^<, G_{k2}^<, G_{p1}^<, G_{p2}^<$, позволяющие решить эту проблему:

$$\begin{aligned}
G_{kk_1}^< &= G_{kk}^{0<} + G_{kk}^{0<}T_{k1}G_{1k_1}^A + G_{kk}^{0R}T_{k1}G_{1k_1}^< + G_{kk}^{0<}T_{k2}G_{2k_1}^A + G_{kk}^{0R}T_{k2}G_{2k_1}^< \\
G_{k1}^< &= G_{kk}^{0R}T_{k1}G_{11}^< + G_{kk}^{0<}T_{k1}G_{11}^A + G_{kk}^{0R}T_{k2}G_{21}^< + G_{kk}^{0<}T_{k2}G_{21}^A \\
G_{k2}^< &= G_{kk}^{0R}T_{k2}G_{22}^< + G_{kk}^{0<}T_{k2}G_{22}^A + G_{kk}^{0R}T_{k1}G_{12}^< + G_{kk}^{0<}T_{k1}G_{12}^A \\
G_{12}^< &= G_{11}^{0R}T_{12}G_{22}^< + G_{11}^{0<}T_{12}G_{22}^A + G_{11}^{0R}T_{k1}G_{k2}^< + G_{11}^{0<}T_{k1}G_{k2}^A \\
G_{21}^< &= G_{22}^{0R}T_{21}G_{11}^< + G_{22}^{0<}T_{21}G_{11}^A + G_{22}^{0R}T_{p2}G_{p1}^< + \\
&+ G_{22}^{0<}T_{p2}G_{p1}^A + G_{22}^{0R}T_{k2}G_{k1}^< + G_{22}^{0<}T_{k2}G_{k1}^A \\
G_{22}^< &= G_{22}^{0<} + G_{22}^{0<}T_{21}G_{12}^A + G_{22}^{0R}T_{21}G_{12}^< + G_{22}^{0<}T_{2p}G_{p2}^A + \\
&+ G_{22}^{0R}T_{2p}G_{p2}^< + G_{22}^{0<}T_{k2}G_{k2}^A + G_{22}^{0R}T_{k2}G_{k2}^< \\
G_{11}^< &= G_{11}^{0<} + G_{11}^{0<}T_{1k}G_{k1}^A + G_{11}^{0R}T_{1k}G_{k1}^< + G_{11}^{0<}T_{12}G_{21}^A + G_{11}^{0R}T_{12}G_{21}^< \\
G_{p2}^< &= G_{pp}^{0R}T_{p2}G_{22}^< + G_{pp}^{0<}T_{p2}G_{22}^A \\
G_{p1}^< &= G_{pp}^{0R}T_{p2}G_{21}^< + G_{pp}^{0<}T_{p2}G_{21}^A
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Данные уравнения также позволяют получить выражения для запаздывающих функций Грина:

$$\begin{aligned}
G_{11}^R &= \frac{\omega - \varepsilon_2 + \iota(\gamma_{k2} + \gamma_{p2})}{(\omega - \varepsilon_1 + \iota\gamma_{k1})(\omega - \varepsilon_2 + \iota(\gamma_{k2} + \gamma_{p2}) - T_{12}^2)} \\
G_{22}^R &= \frac{\omega - \varepsilon_1 + \iota\gamma_{k1}}{(\omega - \varepsilon_1 + \iota\gamma_{k1})(\omega - \varepsilon_2 + \iota(\gamma_{k2} + \gamma_{p2}) - T_{12}^2)} \\
G_{21}^R = G_{12}^R &= \frac{T}{(\omega - \varepsilon_1 + \iota\gamma_{k1})(\omega - \varepsilon_2 + \iota(\gamma_{k2} + \gamma_{p2}) - T_{12}^2)}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

где:

$$\sum_p T_{p2}^2 \text{Im} G_{pp}^{0R} = \gamma_{p2}; \sum_k T_{k1}^2 \text{Im} G_{kk}^{0R} = \gamma_{k1}; \sum_k T_{k2}^2 \text{Im} G_{kk}^{0R} = \gamma_{k2} \tag{3.24}$$

γ_{p2} - скорость ухода электронов из локализованного на острие состояния в состояния непрерывного спектра острия СТМ. γ_{k2} - скорость прихода электронов из состояний непрерывного спектра образца в локализованное на острие СТМ состояние. γ_{k1} - скорость прихода электронов из состояний непрерывного спектра образца в локализованное, образованное примесным атомом. T - амплитуда туннельного перехода электронов из локализованного состояния на поверхности в локализованное состояние на острие зонда.

Функции Грина $G_{11}^<$, $G_{22}^<$ для двух локализованных состояний отличаются от функции Грина $G_{dd}^<$ для случая одной примеси, поскольку включают в себя взаимодействие между локализованными состояниями в туннельном контакте.

Выражение для спектральной плотности туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами проводимости в берегах туннельного контакта содержит три слагаемых и может быть получено с использованием диаграмм, представленных на рис. 3.7:

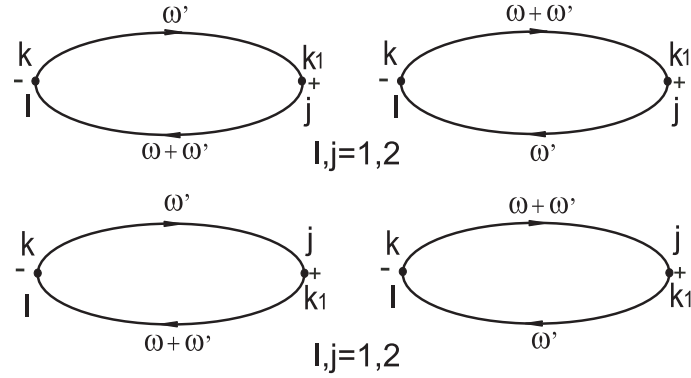


Рис. 3.7. Диаграммы, дающие вклад в спектральную плотность туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия для случая двух локализованных состояний в туннельном контакте.

$$\tilde{S}_0(\omega) = \tilde{S}_{01}(\omega) + \tilde{S}_{02}(\omega) + \tilde{S}_{03}(\omega) \quad (3.25)$$

где, выражения для спектральных плотностей $\tilde{S}_{01}(\omega)$ и $\tilde{S}_{02}(\omega)$ имеют вид аналогичный виду выражения, описывающего спектральную плотность туннельного тока для случая одного зарядового локализованного состояния в области туннельного контакта.

$$\begin{aligned} (\hbar/e)^2 \cdot S_{01}(\omega) = & \gamma_{k1}^2 \cdot \int d\omega' \text{Im}G_{11}^R(\omega') \cdot \text{Im}G_{11}^R(\omega + \omega') \cdot (n_1(\omega + \omega') - 1) \cdot \\ & \cdot (n_1(\omega') - n_k(\omega')) + n_1(\omega') \cdot (n_1(\omega + \omega') - n_k(\omega + \omega')) + \\ + & \gamma_{k1}^2 \cdot \int d\omega' \text{Im}G_{11}^R(\omega') \cdot \text{Im}G_{11}^R(\omega + \omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1) \cdot \\ & \cdot n_1(\omega') - n_1(\omega') \cdot (n_1(\omega + \omega') - 1) - n_k(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega') + \\ + & n_k(\omega') \cdot (n_1(\omega + \omega')) + \gamma_{k1} \cdot \int d\omega' (\text{Im}G_{11}^R(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega')) \cdot \end{aligned}$$

$$\cdot (n_1(\omega + \omega') - 1) + ImG_{11}^R(\omega') \cdot n_1(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1)) = \tilde{S}_{01} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} (\hbar/e)^2 \cdot S_{02}(\omega) &= \gamma_{k2}^2 \cdot \int d\omega' ImG_{22}^R(\omega') \cdot ImG_{22}^R(\omega + \omega') \cdot (n_2(\omega + \omega') - 1) \cdot \\ &\cdot (n_2(\omega') - n_k(\omega')) + n_2(\omega') \cdot (n_2(\omega + \omega') - n_k(\omega + \omega')) + \\ &+ \gamma_{k2}^2 \cdot \int d\omega' ImG_{22}^R(\omega') \cdot ImG_{22}^R(\omega + \omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1) \cdot \\ &\cdot n_2(\omega') - n_2(\omega') \cdot (n_2(\omega + \omega') - 1) - n_k(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega') + \\ &+ n_k(\omega') \cdot (n_2(\omega + \omega')) + \gamma_{k2} \cdot \int d\omega' (ImG_{22}^R(\omega + \omega') \cdot n_k(\omega') \cdot \\ &\cdot (n_2(\omega + \omega') - 1) + ImG_{22}^R(\omega') \cdot n_2(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1)) = \tilde{S}_{02} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Выражение для спектральной плотности туннельного тока $\tilde{S}_{03}(\omega)$ обусловлено учетом возможности туннелирования электронов из состояний непрерывного спектра исследуемой поверхности (полупроводника) как в локализованное состояние на острие зонда (амплитуда туннельного перехода T_{k2}), так и в локализованное состояние, образованное примесным атомом (амплитуда туннельного перехода T_{k1}).

$$\begin{aligned} (\hbar/e)^2 \cdot S_{03}(\omega) &= 8 \cdot \gamma_{k1} \cdot \gamma_{k2} \cdot \int d\omega' ImG_{11}^R(\omega') \cdot ImG_{22}^R(\omega + \omega') \cdot \\ &\cdot (n_1(\omega') \cdot (n_2(\omega + \omega') - 1) + n_k(\omega') \cdot (n_2(\omega + \omega') - 1)) + \\ &+ (n_1(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1) - n_k(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1) + \\ &+ 8 \cdot \gamma_{k1} \cdot \gamma_{k2} \cdot \int d\omega' ImG_{22}^R(\omega') \cdot ImG_{11}^R(\omega + \omega') \cdot \\ &\cdot (n_2(\omega') \cdot (n_1(\omega + \omega') - 1) + n_k(\omega') \cdot (n_1(\omega + \omega') - 1) + \\ &+ (n_2(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1) - n_k(\omega') \cdot (n_k(\omega + \omega') - 1))) = \\ &= \tilde{S}_{03} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Неравновесные числа заполнения $n_1(\omega)$ и $n_2(\omega)$ определяются из кинетических уравнений и могут быть представлены в виде:

$$n_1 = \frac{\eta \cdot ImG_{22}^R \cdot (\gamma_{p2} \cdot n_p + \gamma_{k2} \cdot n_k) + \eta \cdot \gamma_{k1} \cdot n_k \cdot ImG_{11}^R}{ImG_{11}^R \cdot (\eta \cdot \gamma_{k1} + (\eta + \gamma_{k1}) \cdot (\gamma_{k2} + \gamma_{p2}))}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{-\gamma_{k1}n_k(\gamma_{k2} + \gamma_{p2}) \cdot \text{Im}G_{11}^R + (\gamma_{k2} + \gamma_{p2})n_kT(\gamma_{k2} \cdot \text{Im}(R_{21}G_{21}^A))}{\text{Im}G_{11}^R \cdot (\eta \cdot \gamma_{k1} + (\eta + \gamma_{k1}) \cdot (\gamma_{k2} + \gamma_{p2}))} - \\
& - \frac{\gamma_{k1} \cdot \text{Im}(R_{21} \cdot G_{21}^R) + \gamma_{p2}(\gamma_{k2} + \gamma_{p2})n_p \cdot T \cdot \text{Im}(R_{21}G_{21}^A)}{\text{Im}G_{11}^R \cdot (\eta \cdot \gamma_{k1} + (\eta + \gamma_{k1}) \cdot (\gamma_{k2} + \gamma_{p2}))}
\end{aligned} \tag{3.29}$$

$$\begin{aligned}
n_2 &= \frac{(\eta + \gamma_{k1}) \cdot \text{Im}G_{22}^R \cdot (\gamma_{p2}n_p + \gamma_{k2}n_k) + \eta \cdot \gamma_{k1} \cdot n_k \cdot \text{Im}G_{11}^R}{\text{Im}G_{22}^R \cdot (\eta \cdot \gamma_{k1} + (\eta + \gamma_{k1}) \cdot (\gamma_{k2} + \gamma_{p2}))} + \\
&+ \frac{(\gamma_{k2}\gamma_{k1}n_kT + \gamma_{p2}\gamma_{k1}n_pT) \cdot \text{Im}(R_{21}G_{21}^A) - \gamma_{k1}^2n_kT \cdot \text{Im}(R_{21}G_{21}^R)}{\text{Im}G_{22}^R \cdot (\eta \cdot \gamma_{k1} + (\eta + \gamma_{k1}) \cdot (\gamma_{k2} + \gamma_{p2}))}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

где

$$\eta = T^2 \cdot \text{Im}R_{21}, R_{21} = \frac{1}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1 - i \cdot (\gamma_{k1} + \gamma_{k2} + \gamma_{p2})} \tag{3.31}$$

Вклад в слагаемое $\tilde{S}_{01}(\omega)$ дают диаграммы, для которых индексы i и j принимают одновременно значение равное единице $i = j = 1$ (рис. **3.7**); слагаемое $\tilde{S}_{02}(\omega)$ обусловлено диаграммами, для которых индексы i и j принимают одновременно значение равное двум $i = j = 2$ (рис. **3.7**); вклад в слагаемое $\tilde{S}_{03}(\omega)$ связан с диаграммами, для которых значения индексов i и j различны $i \neq j$ (рис. **3.7**).

Спектральные зависимости туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами непрерывного спектра в берегах контакта при различных значениях параметров туннельного перехода в случае выполнении условия $eV = \varepsilon_1 = \varepsilon_2$ представлены на рис. **3.8**.

Полученные зависимости демонстрируют, что при стремлении частоты к нулю значение амплитуды низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине для случая двух зарядовых локализованных состояний в области туннельного контакта. Амплитуда спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте превосходит амплитуду на частотах отличных от нуля. Анализ спектральных зависимостей позволяет сделать следующий вывод: амплитуды спектральных зависимостей спадают по одинаковому закону с ростом частоты для случаев, когда совпадают величины матричных элементов туннельных переходов электронов из локализованного состояния на

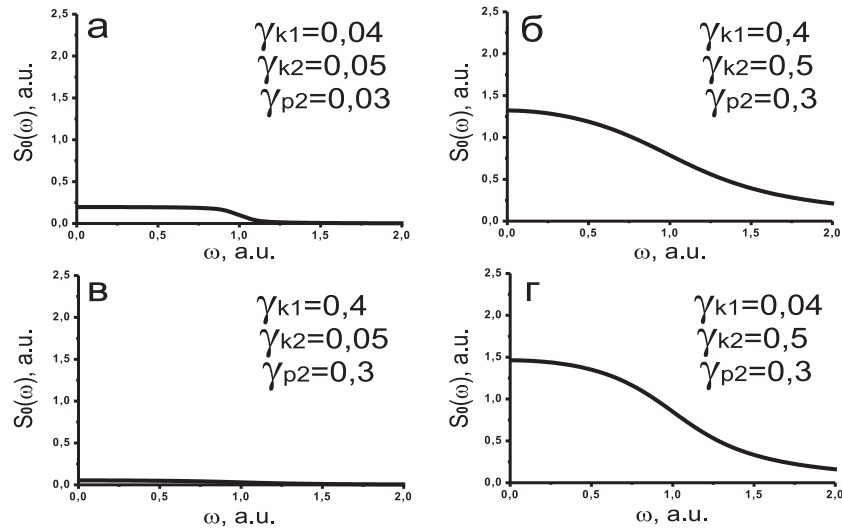


Рис. 3.8. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей переходов для двух локализованных состояний в туннельном контакте. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $T = 0,01$.

острие зонда СТМ в состоянии непрерывного спектра зонда СТМ (одинаковые γ_{p2}), и когда совпадают величины матричных элементов туннельных переходов электронов в состояния непрерывного спектра поверхности полупроводника (одинаковые γ_{k2}).

Учтем эффекты кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями в туннельном переходе и электронами непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Выражение для спектральной плотности туннельного тока при наличии кулоновского взаимодействия можно получить перенормировав амплитуды туннельных переходов в области туннельного контакта. Для этого необходимо провести перенормировку вершин диаграмм, представленных на рис. 3.7. Для случая двух зарядовых локализованных состояний необходимо перенормировать обе вершины на диаграммах.

Вклад в спектральную плотность туннельного тока с учетом кулоновского взаимодействия описывается диаграммами, представленными на рис. 3.9. Типы диаграмм, приводящих к появлению сингулярной логарифмической расходимости в окрестности нулевой частоты в случае резонансного туннелирования при перенормировке вершин аналогичны типам диаграмм, получающимся в результате перенормировки вершин для случая одной примеси в туннельном контакте. Вклады в сингулярную расходимость дают ряды диаграмм, полученные в результате:

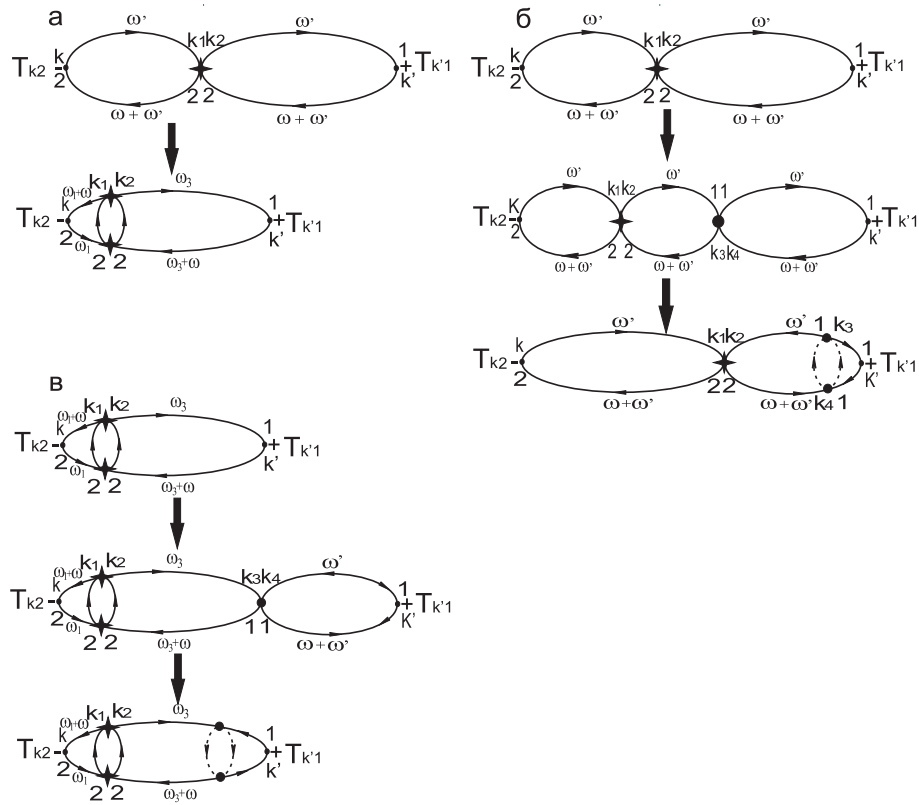


Рис. 3.9. Перенормированные диаграммы низших порядков по кулоновскому взаимодействию, дающие вклад в спектральную плотность туннельного тока для случая двух локализованных состояний в туннельном контакте. Точкой обозначен кулон W_1 , звездочкой обозначен кулон W_2 .

1. перенормировки вершин за счет кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на поверхности с электронами в состояниях непрерывного спектра (рис. **3.9 а**);
2. перенормировки вершин за счет кулоновского взаимодействия зарядового состояния локализованного на острие СТМ с электронами в состояниях непрерывного спектра (рис. **3.9 а**);
3. совместной перенормировки вершин с одновременным учетом кулоновского взаимодействия обоих локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра. В случае совместной перенормировки вершин каждой диаграмме, учитывающей кулоновское взаимодействие для одного локализованного состояния, соответствует весь ряд диаграмм для другого локализованного состояния (рис. **3.9 б,в**).

Выражение для спектральной плотности туннельного тока с учетом кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состо-

ниями и электронами проводимости в берегах туннельного контакта может быть записано в виде:

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(\omega) = & \tilde{S}_0(\omega) + \tilde{S}_{01}(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{(\omega + E_1)^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{1\nu}} + \left(\frac{D^2}{(\omega + E_2)^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{1\nu}} \right) + \\
& + \tilde{S}_{02}(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{(-\omega + E_1)^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{2\nu}} + \left(\frac{D^2}{(-\omega + E_2)^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{2\nu}} \right) + \\
& + \tilde{S}_{03}(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{(\omega + E_1)^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{1\nu}} + \left(\frac{D^2}{(\omega + E_2)^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{1\nu}} \right) \cdot \\
& \cdot \left(\left(\frac{D^2}{(-\omega + E_1)^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{2\nu}} + \left(\frac{D^2}{(-\omega + E_2)^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{2\nu}} \right) \quad (3.32)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
E_1 &= eV - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4T^2}}{2} \\
E_2 &= eV - \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4T^2}}{2} \\
\Gamma_1 &= \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\gamma_{k2} + \gamma_{p2} - \gamma_{k1})}{2\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4T^2}} + \frac{\gamma_{k2} + \gamma_{p2} - \gamma_{k1}}{2} \\
\Gamma_2 &= \frac{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)(\gamma_{k2} + \gamma_{p2} - \gamma_{k1})}{2\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4T^2}} - \frac{\gamma_{k2} + \gamma_{p2} - \gamma_{k1}}{2} \quad (3.33)
\end{aligned}$$

D - ширина разрешенной зоны состояний непрерывного спектра, ν - равновесная плотность состояний в берегах туннельного контакта, W - энергия кулоновского взаимодействия.

При резонансном туннелировании через два зарядовых локализованных состояния в области туннельного контакта аналогично случаю с одним локализованным состоянием полагаем $eV = \varepsilon_1 = \varepsilon_2$. Тогда выражение (3.32) принимает вид:

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(\omega) = & \tilde{S}_0(\omega) + \tilde{S}_{01}(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{1\nu}} + \left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{1\nu}} \right) + \\
& + \tilde{S}_{02}(\omega) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{2\nu}} + \left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{2\nu}} \right) + \tilde{S}_{03}(\omega) \cdot \\
& \cdot \left(\left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{1\nu}} + \left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{1\nu}} \right) \cdot \left(\left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_1^2} \right)^{W_{2\nu}} + \left(\frac{D^2}{\omega^2 + \Gamma_2^2} \right)^{W_{2\nu}} \right) \quad (3.34)
\end{aligned}$$

Полученное выражение показывает, что вклад в спектральную плотность туннельного тока дают как слагаемые, обусловленные простыми диаграммами, так и слагаемые, связанные с учетом кулоновского взаимодействия каждого из зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Кроме того, существует слагаемое, учитывающее совместное взаимодействие локализованных состояний с электронами в берегах туннельного контакта. Величина вклада каждого из слагаемых, учитывающих кулоновское взаимодействие в спектральную плотность туннельного тока, зависит от параметров туннельного контакта и от рассматриваемой области частот. Спектры туннельного тока в области низких частот, полученные для резонансного туннелирования через два положительно заряженных локализованных состояния с близкими по величине значениями энергий кулоновского взаимодействия с электронами в состояниях непрерывного спектра, представлены на рис. 3.10.

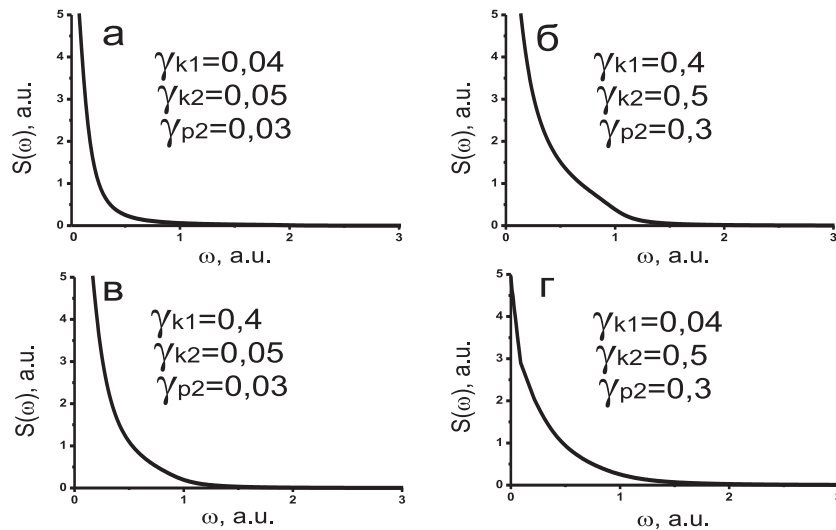


Рис. 3.10. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей переходов для двух локализованных состояний в туннельном контакте. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $W_1 = 0,4$, $W_2 = 0,3$, $T = 0,01$.

Спектральные зависимости демонстрируют, что учет кулоновского взаимодействия, связанного с наличием в области туннельного контакта зарядовых локализованных состояний, приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока в окрестности нулевой частоты. С уменьшением частоты наблюдается степенное возрастание амплитуды спектральной плотности туннельного тока.

Рассмотрим спектры туннельного тока, представленные в двойном

логарифмическом масштабе, для различных значений энергий кулоновского взаимодействия и различных параметров туннельного контакта. Для определения областей частот, в которых каждое из слагаемых в выражении (3.34), дающих определяемый кулоновским взаимодействием сингулярный вклад в спектральную плотность туннельного тока наилучшим образом аппроксимирует спектральную зависимость (то есть дает доминирующий вклад в спектр), построим не только полные спектры туннельного тока, но и каждое из слагаемых, учитывающих кулоновское взаимодействие по отдельности для фиксированного набора параметров. Поскольку каждое из зарядовых локализованных состояний может обладать как положительным, так и отрицательным зарядом, а величина показателя α определяется зарядовым состоянием примесного атома, то для полного анализа туннельных процессов в системе с двумя локализованными состояниями необходимо рассмотреть все возможные комбинации знаков зарядов локализованных состояний. Сначала рассмотрим ситуацию, когда оба зарядовых локализованных состояния имеют положительный заряд и близкие по величине значения уровней энергии (рис. 3.11).

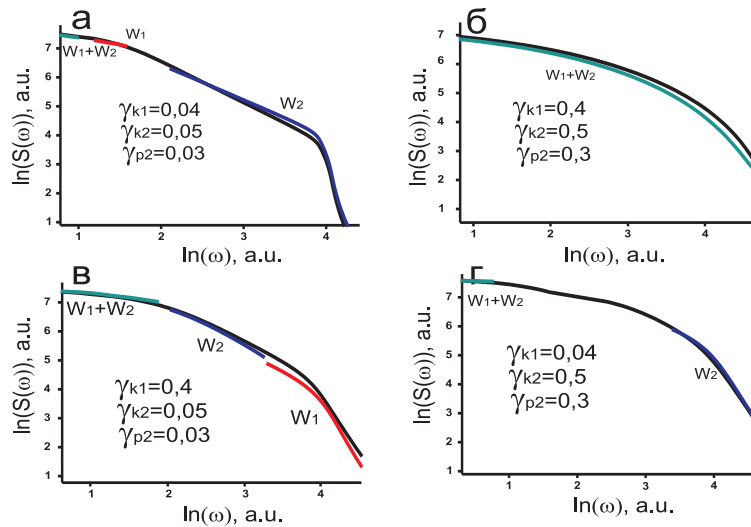


Рис. 3.11. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух локализованных состояний в туннельном контакте в двойном логарифмическом масштабе. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $W_1 = 0,4$, $W_2 = 0,3$, $T = 0,01$.

На спектрах туннельного тока, представленных в двойном логарифмическом масштабе, наблюдается отклонение от линейного закона с ростом частоты. Такое поведение можно объяснить тем, что на малых частотах преобладает вклад в спектральную плотность от слагаемых, приводящих к сингулярной расходимости в окрестности нулевой частоты и связанных

с перенормировкой амплитуд туннельного перехода при учете кулоновского взаимодействия. Слагаемое, описывающее спектральную плотность туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия, дает незначительный постоянный по амплитуде вклад в полный спектр в окрестности нулевой частоты (рис. 3.8).

С ростом частоты вклад от слагаемых, приводящих к сингулярной расходимости в окрестности нулевой частоты, перестает доминировать, и его амплитуда выходит на постоянное значение. Вклад от слагаемого, не учитывающего кулоновское взаимодействие, с увеличением частоты демонстрирует уменьшение амплитуды. Такое поведение спектральных зависимостей, полученных без учета кулоновского взаимодействия, и обуславливает отклонение полной спектральной зависимости в двойном логарифмическом масштабе от линейного закона.

Спектральные зависимости позволяют сделать следующий вывод: в окрестности нулевой частоты для любых значений параметров туннельного контакта низкочастотная составляющая спектральной плотности туннельного тока определяется слагаемым, дающим наиболее сильную сингулярную расходимость, обусловленную суммарной энергией кулоновского взаимодействия двух зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Представленные на рис. 3.11 б спектральные зависимости, наилучшим образом могут быть аппроксимированы слагаемым, определяемым суммарной энергией кулоновского взаимодействия двух зарядовых локализованных состояний в туннельном контакте с электронами непрерывного спектра при любых значениях частоты. В этом случае величина матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованным состоянием, образованным примесным атомом, и состояниями непрерывного спектра полупроводника превосходит на порядок величину матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованными состояниями (T).

Для представленной на рис. 3.11 г спектральной зависимости с ростом частоты основной вклад в спектральную плотность туннельного тока обусловлен слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на острие зонда СТМ с электронами непрерывного спектра. Величина матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованным

состоянием, образованным примесным атомом, и состояниями непрерывного спектра полупроводника имеет тот же порядок, что и величина матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованными состояниями (T). Матричный элемент туннельного перехода между локализованным на острие зонда СТМ состоянием и состояниями непрерывного спектра полупроводника превосходит на порядок величину матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованным состоянием, образованным примесным атомом на поверхности, и состояниями непрерывного спектра полупроводника.

На спектральных зависимостях, приведенных на рис. **3.11 а** с ростом частоты основной вклад в спектральную плотность туннельного тока обусловлен слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованным примесным атомом. При дальнейшем росте частоты спектральная плотность туннельного тока определяется слагаемым, связанным с локализованным состоянием на острие зонда СТМ и, следовательно, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на острие зонда СТМ с электронами непрерывного спектра. В этом случае величины матричных элементов туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованными состояниями в области туннельного контакта и состояниями непрерывного спектра полупроводника имеют тот же порядок, что и величина матричного элемента туннельных переходов электронов (скорости переходов) между локализованными состояниями (T).

Для туннельного спектра, представленного на рис. **3.11 в**, с ростом частоты вклад в спектральную плотность туннельного тока обусловлен слагаемым, определяемым энергией кулоновского взаимодействия локализованного состояния на острие СТМ с электронами в состояниях непрерывного спектра. При последующем увеличении частоты спектр определяется слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом.

Теперь рассмотрим зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты в двойном логарифмическом масштабе для случая, когда оба зарядовых локализованных состояния имеют положительный заряд, и величина одной из энергий взаимодействия значительно превосходит величину другой (рис. **3.12**).

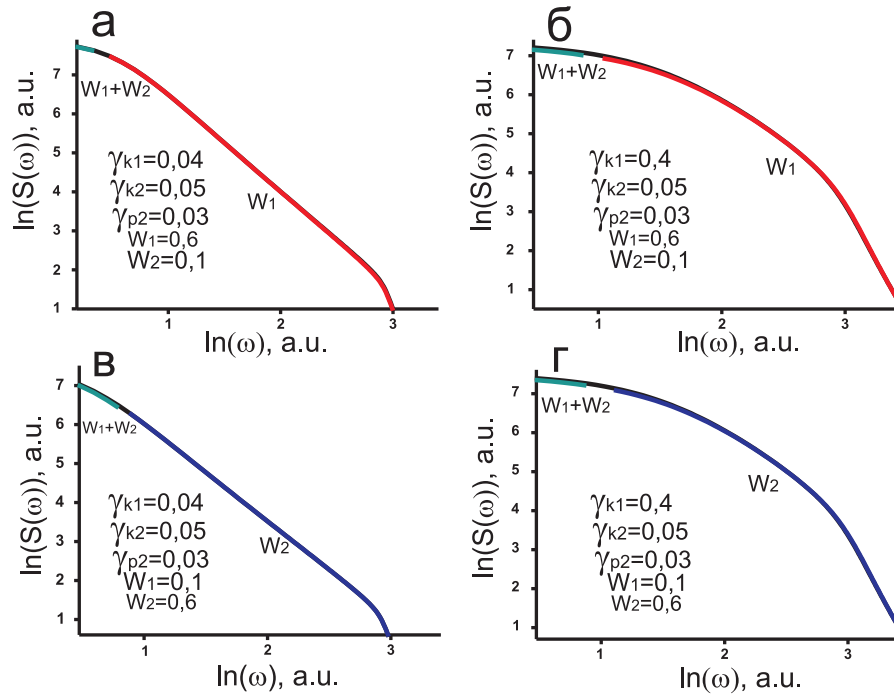


Рис. 3.12. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух локализованных состояний в туннельном контакте в двойном логарифмическом масштабе. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $T = 0,01$.

Спектральные зависимости демонстрируют, что в окрестности нулевой частоты для любых значений параметров туннельного контакта низкочастотная составляющая спектральной плотности туннельного тока определяется слагаемым, дающим наиболее сильную сингулярную расходимость, обусловленную суммарной энергией кулоновского взаимодействия двух зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра.

С ростом частоты спектральная плотность туннельного тока определяется слагаемым, зависящим от наибольшего по величине значения энергии кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Теперь рассмотрим ситуацию, когда локализованные состояния имеют заряды разных знаков. Спектральные плотности туннельного тока для различных значений параметров туннельного контакта представлены на рис. 3.13. Спектральные зависимости демонстрируют, что учет кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами проводимости в берегах туннельного контакта приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной

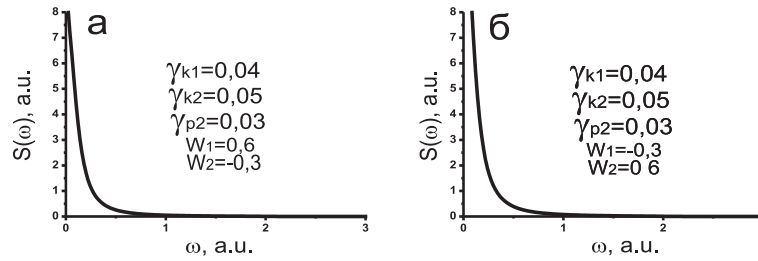


Рис. 3.13. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух локализованных состояний с зарядами разных знаков в туннельном контакте. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $T = 0,01$.

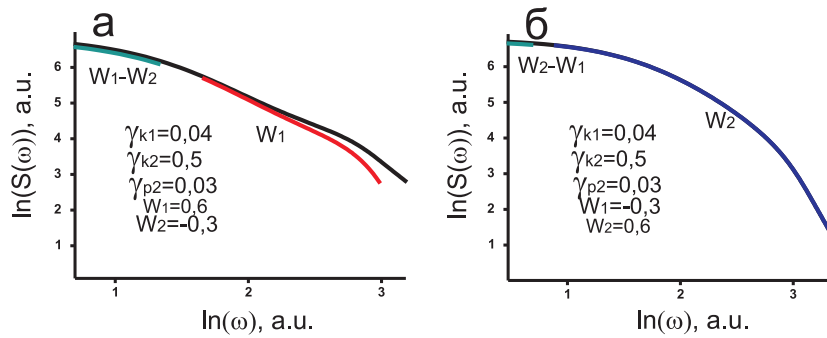


Рис. 3.14. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух локализованных состояний с зарядами разных знаков в туннельном контакте в двойном логарифмическом масштабе. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1$, $T = 0,01$.

плотности туннельного тока в окрестности нулевой частоты для случая локализованных состояний с зарядами разных знаков.

Спектры туннельного тока, представленные в двойном логарифмическом масштабе (рис. 3.14), позволяют сделать следующий вывод: когда локализованные состояния в области туннельного контакта имеют заряды разных знаков для любых параметров туннельного контакта низкочастотная составляющая спектров туннельного тока наилучшим образом может быть аппроксимирована слагаемым, зависящим от наибольшей по величине разности значений энергий кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Рассмотрим случай, когда оба локализованных состояния имеют заряды отрицательных знаков. Представленные на рис. 3.15 спектры туннельного тока демонстрируют, что при стремлении частоты к нулю амплитуда низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине при различных значениях параметров туннельного перехода, то есть происходит подавление сингулярного поведения спектральной плотности в окрестности нулевой частоты.

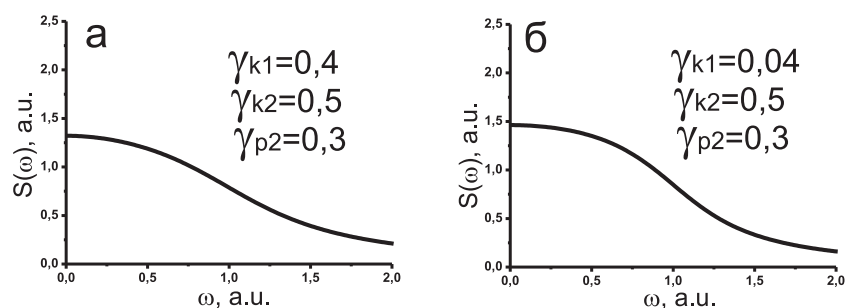


Рис. 3.15. Зависимости низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух локализованных состояний в туннельном контакте в двойном логарифмическом масштабе. $eV = \varepsilon_2 = \varepsilon_1, W_1 = -0,4, W_2 = -0,3, T = 0,01$.

Таким образом, предложена теоретическая модель, которая на микроскопическом уровне объясняет сингулярное поведение низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$. Показано, что в отсутствие кулоновского взаимодействия амплитуда низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока принимает конечное значение на нулевой частоте. Выявлено, что формирование шума со спектром $1/f^\alpha$ в туннельном контакте происходит в результате многократного рассеяния электронов проводимости на кулоновском потенциале, вызванным изменением заряда локализованного состояния в области туннельного контакта в процессе туннелирования электронов. Рассмотрены все возможные комбинации знаков зарядов локализованных состояний. Показано, что сингулярное поведение низкочастотной составляющей туннельного тока наблюдается в случае, когда хотя бы одно из локализованных состояний имеет положительный заряд. В случае, когда оба локализованных состояния имеют отрицательный заряд происходит подавление низкочастотной сингулярной особенности в спектральной плотности туннельного тока. Таким образом, предложенную модель можно использовать для определения типа и зарядового состояния примесных атомов, локализованных в полупроводниковой матрице. Предложенная модель позволяет объяснить результаты экспериментальных исследований низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока вида $1/f^\alpha$, выполненные методом СТМ/СТС [276, 277].

Размерная оценка дает возможность оценить степень достоверности полученных в предложенной модели выражений для спектральной плотности туннельного тока. Для типичных значений параметров модели значение величины спектральной плотности мощности туннельного тока в

окрестности нулевой частоты хорошо соответствует экспериментально измеренным значениям [276, 277]. Перевод безразмерных величин амплитуд спектральной плотности туннельного тока в размерные на нулевой частоте (для мощностного спектра $A^2/\text{Гц}$) производится по формуле

$$S(0) \approx (\gamma_{eff} \cdot e/\hbar)^2 \cdot (D/\gamma_{eff1})^{\nu \cdot W} \cdot (1/\Delta\omega) \quad (3.35)$$

Для типичных значений параметров $\gamma_{eff}, \gamma_{eff1} \sim 10^{-13} \text{ с}^{-1}$, $D = 10 \text{ эВ}$, $W = 0,5 \text{ эВ}$ получим величину $S(0) = 10^{-12} \text{ А}^2/\text{Гц}$.

§ 3.3. Формирование высокочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока при туннелировании через зарядовые локализованные состояния

Отдельный интерес представляет исследование вопроса о возможности сдвига сингулярных особенностей в спектре туннельного тока из низкочастотной области в высокочастотную при изменении параметров туннельной системы. Поскольку величина сдвига определяется внутренними параметрами системы, а возникновение сингулярности связано с зарядовым состоянием, то эффект сдвига может быть использован для определения типа и зарядового состояния примесного атома. Рассмотрим процессы туннелирования электронов через два зарядовых локализованных состояния одно из которых образовано примесным атомом на поверхности, а второе расположено на острие зонда СТМ [280, 281]. Будем считать, что зонд СТМ является металлом с кластером на острие. В этом случае локализованное состояние на острие зонда СТМ совпадает по энергии с уровнем Ферми зонда, и, следовательно, выполнено условие $eV = \varepsilon_2$. Туннелирование электронов из локализованного состояния острия в состояния непрерывного спектра зонда СТМ будет происходить резонансным образом, а туннелирование электронов между локализованными состояниями будет носить нерезонансный характер ($\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$) [279].

Используя выражение (3.25) для спектральной плотности туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами в состояниях непрерывного спектра, можно построить спектральные зависимости для случая нерезо-

нансного туннелирования электронов между локализованными состояниями (рис. 3.16).

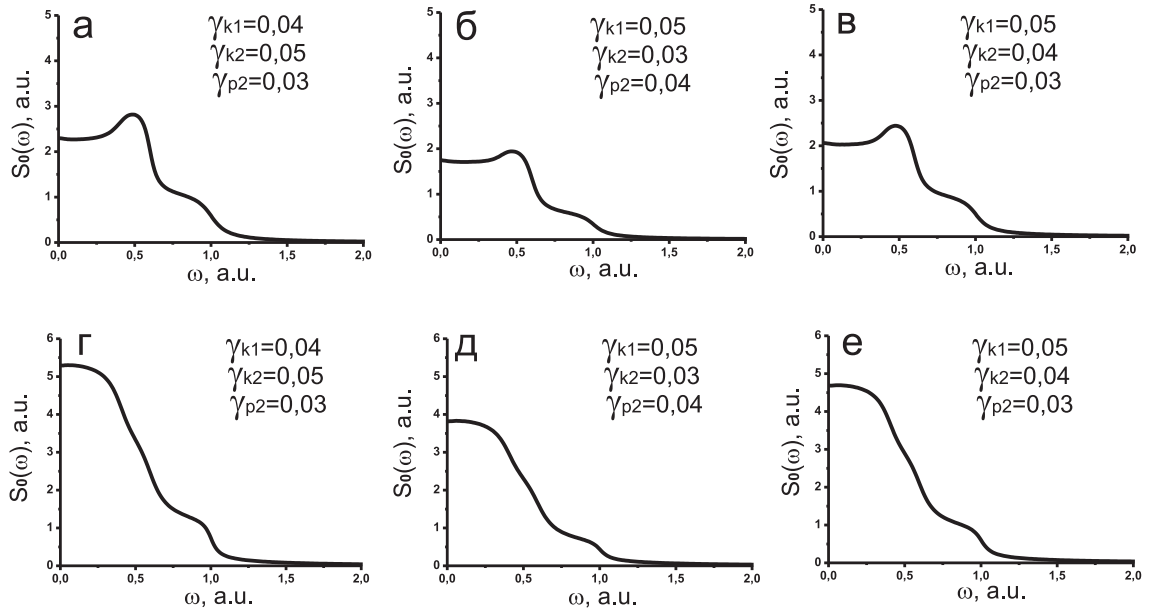


Рис. 3.16. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия для различных параметров туннельного контакта. а)-в) $\varepsilon_1 = 1$, $eV = \varepsilon_2 = 0,6$, $T = 0,01$, г)-е) $\varepsilon_1 = 0,6$, $eV = \varepsilon_2 = 1$, $T = 0,01$.

Представленные зависимости показывают, что при стремлении частоты к нулю амплитуда низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине для любых значений параметров туннельного контакта. Значение амплитуды спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте превосходит значения на частотах отличных от нуля, когда уровень энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом, расположен по энергии выше уровня локализованного состояния на острие зонда СТМ (рис. 3.16 г-е). Если уровень энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом, расположен по энергии ниже уровня локализованного состояния на острие зонда СТМ, то значение амплитуды спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте не является наибольшим. С увеличением частоты наблюдается рост амплитуды с последующим достижением максимального значения (рис. 3.16 а-в).

Перенормировка вершин диаграмм, приведенных на рис. 3.7, позволяет учесть эффекты кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта и дает выражение (3.32) для спектральной плотности туннельного тока.

Для рассматриваемого случая, когда локализованное состояние на острие зонда СТМ совпадает по энергии с уровнем Ферми зонда, и выполнено условие $eV = \varepsilon_2$, спектры туннельного тока имеют вид, представленный на рис. 3.17.

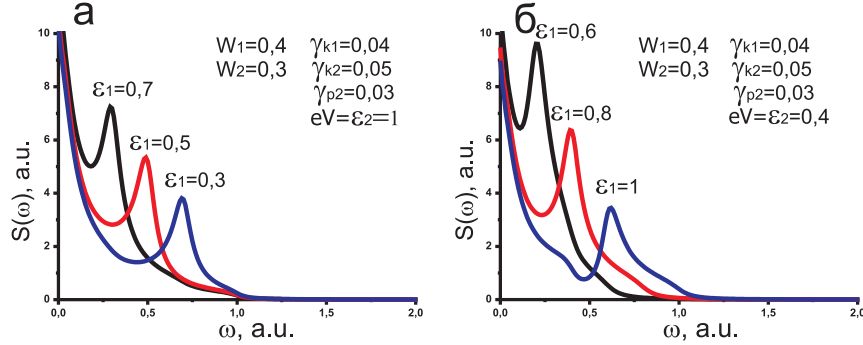


Рис. 3.17. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различном положении уровня энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом. $T = 0,01$.

Спектральные зависимости демонстрируют, что учет кулоновского взаимодействия, связанного с наличием в туннельном контакте зарядовых локализованных состояний, приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока в окрестности нулевой частоты и возникновению ярко выраженного высокочастотного пика на частоте, соответствующей разности значений энергий уровней локализованных состояний ($\varepsilon_2 - \varepsilon_1$). Появление пика вызвано сингулярным поведением спектральной плотности туннельного тока на частоте $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$.

Исследуем вид спектральной плотности туннельного тока с учетом кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра при различных значениях параметров туннельного контакта и различных соотношениях между энергиями кулоновского взаимодействия. Рассмотрим случай, когда оба локализованных состояния имеют положительный заряд (рис. 3.18).

Основываясь на представленных на рис. 3.18 зависимостях можно сделать следующий вывод: при любых параметрах туннельного контакта и любых соотношениях между энергиями кулоновского взаимодействия для положительно заряженных локализованных состояний спектральные зависимости демонстрируют сингулярное поведение в низкочастотной области и имеют пик на разностной частоте. Амплитуда пика зависит не только от величин матричных элементов туннельных переходов электронов в области

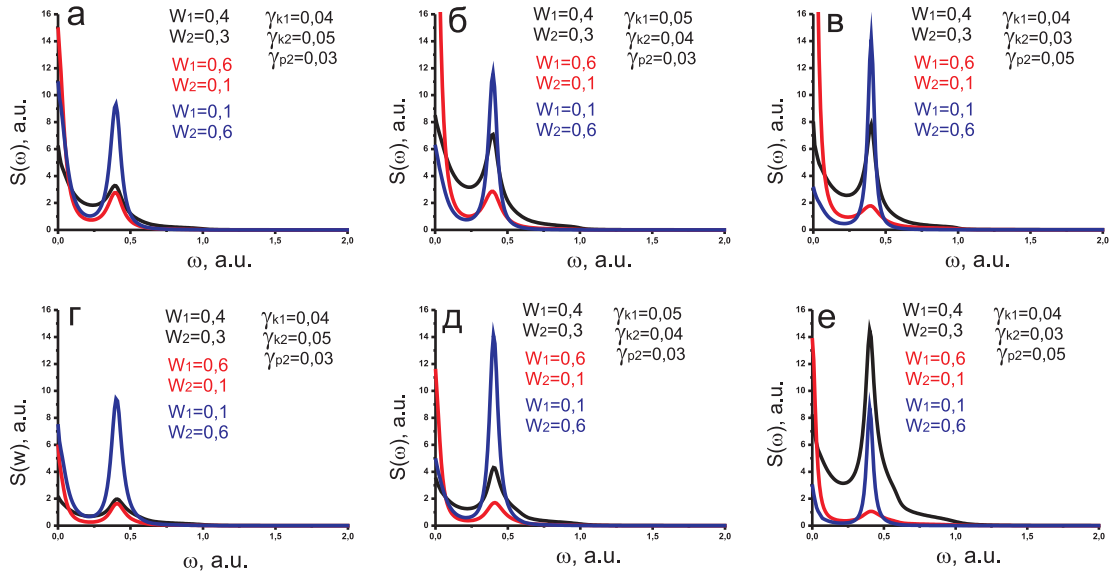


Рис. 3.18. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях параметров туннельного контакта и энергиях кулоновского взаимодействия. а)-в) $\varepsilon_1 = 0,6$, $eV = \varepsilon_2 = 1$, $T = 0,01$, г)-е) $\varepsilon_1 = 1$, $eV = \varepsilon_2 = 0,6$, $T = 0,01$.

контакта, но и от соотношения между энергиями кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра.

При заданном наборе скоростей переходов наибольшее значение амплитуды пика на разностной частоте соответствует случаю, когда величина кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на острие зонда СТМ с электронами непрерывного спектра значительно превосходит величину кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами непрерывного спектра.

Рассмотрим спектры туннельного тока, представленные в двойном логарифмическом масштабе, для различных соотношений между величинами энергий кулоновского взаимодействия. С целью нахождения областей частот, для которых каждое из слагаемых, дающих определяемый кулоновским взаимодействием сингулярный вклад в выражение для спектральной плотности туннельного тока, наилучшим образом аппроксимирует спектральную зависимость, построим полные спектры и каждое из слагаемых, учитывающих кулоновское взаимодействие, по отдельности для фиксированного набора параметров (рис. 3.19).

Сравнение представленных на рис. 3.19 спектральных зависимостей

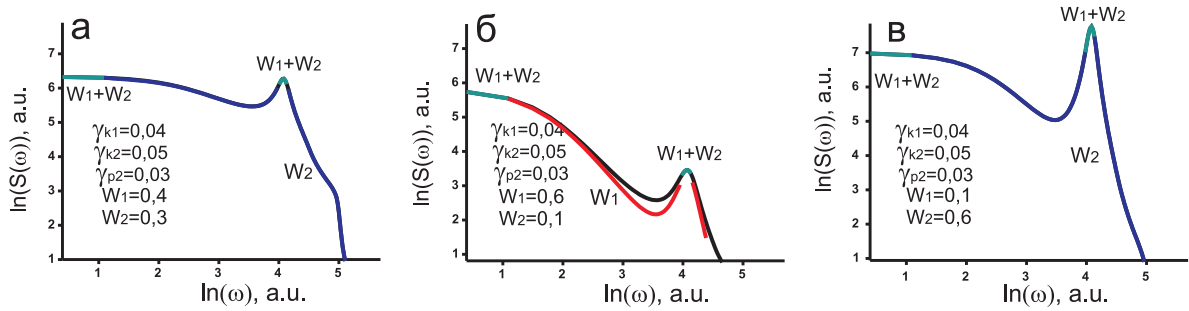


Рис. 3.19. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода и различных соотношениях между энергиями кулоновского взаимодействия (двойной логарифмический масштаб). $\varepsilon_1 = 1$, $eV = \varepsilon_2 = 0,6$, $T = 0,01$.

позволяет сделать следующий вывод: в окрестности нулевой частоты и в окрестности частоты, соответствующей разности энергий уровней локализованных состояний для любых значений параметров туннельного контакта и любых соотношений между значениями энергий, спектральная плотность туннельного тока определяется слагаемым, дающим наиболее сильную сингулярную расходимость, обусловленную суммарной энергией кулоновского взаимодействия двух зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Для близких значений энергий кулоновского взаимодействия и для случая, когда энергии кулоновского взаимодействия состояния локализованного на острие СТМ с электронами непрерывного спектра превосходит энергию кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами проводимости для любых значений параметров туннельного контакта спектр туннельного тока, за исключением окрестностей нулевой и разностных частот, может быть аппроксимирован слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного на острие зонда СТМ состояния с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Если значение энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами непрерывного спектра превосходит значение энергии кулоновского взаимодействия состояния, локализованного на острие СТМ, с электронами проводимости для любых значений параметров туннельного контакта, спектр туннельного тока, за исключением окрестностей нулевой и разностных частот, может быть аппроксимирован наилучшим образом слагаемым, зависящим от

энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованным примесным атомом, с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Когда локализованные состояния в туннельном контакте имеют заряды разных знаков, спектральные плотности туннельного тока в линейном и в двойном логарифмическом масштабах имеют вид, представленный на рис. 3.20.

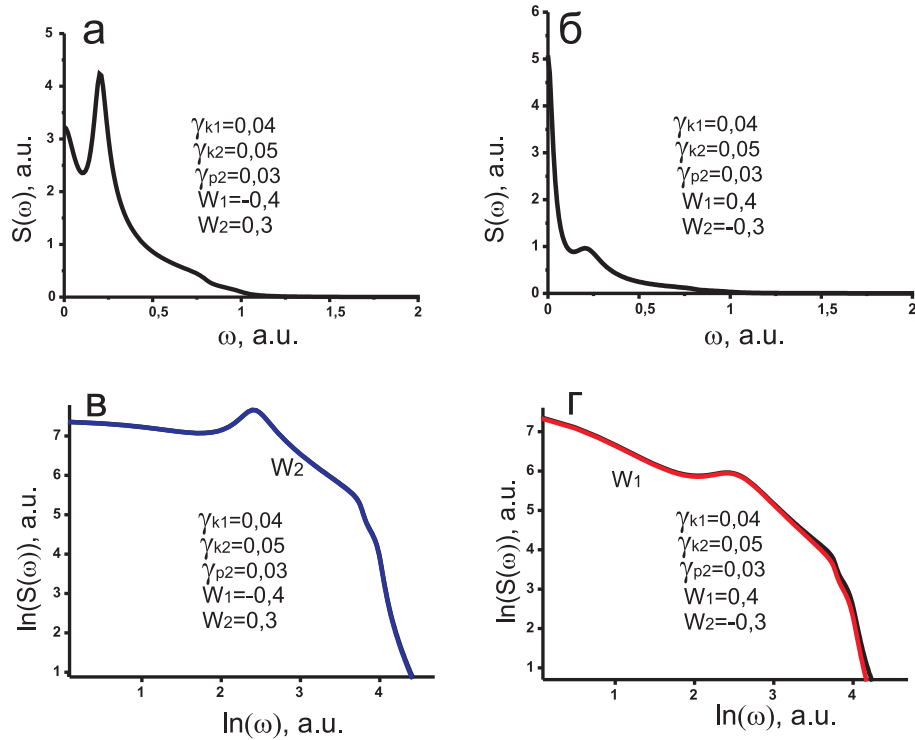


Рис. 3.20. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для локализованных состояний с зарядами разных знаков в линейном масштабе и в двойном логарифмическом масштабе. а), б) $\varepsilon_1 = 1$, $eV = \varepsilon_2 = 0,8$, $T = 0,01$, в), г) $\varepsilon_1 = 0,8$, $eV = \varepsilon_2 = 1$, $T = 0,01$.

На их основании можно сделать следующий вывод: учет кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами проводимости в состояниях непрерывного спектра приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока в окрестности нулевой частоты и к появлению пика на частоте, соответствующей разности значений энергий уровней локализованных состояний. Положение пика напрямую определяется типом примесного атома (значение уровня энергии для различных примесных атомов различается), поэтому совместное использование экспериментального метода СТМ/СТС и предложенной модели может быть использовано в

качестве методики для определения типа примесного атома в полупроводниковой матрице.

Зависимости, представленные на рис. 3.20 в двойном логарифмическом масштабе, для различных величин энергий кулоновского взаимодействия демонстрируют, что при наличии в области туннельного контакта локализованных состояний с зарядами разных знаков, для любых параметров туннельного контакта спектры туннельного тока при любом значении частоты наилучшим образом могут быть аппроксимированы слагаемым, зависящим от наибольшей по величине энергии кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Если оба локализованных состояния имеют заряды отрицательных знаков (рис. 3.21), то спектры туннельного тока демонстрируют стремление амплитуды низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока к постоянной величине при стремлении частоты к нулю для различных значений параметров туннельного перехода, и отсутствие пика в высокочастотной области спектра. Таким образом, происходит подавление сингулярного поведения в спектральной плотности туннельного тока как в окрестности нулевой частоты, так и в окрестности разностной частоты.

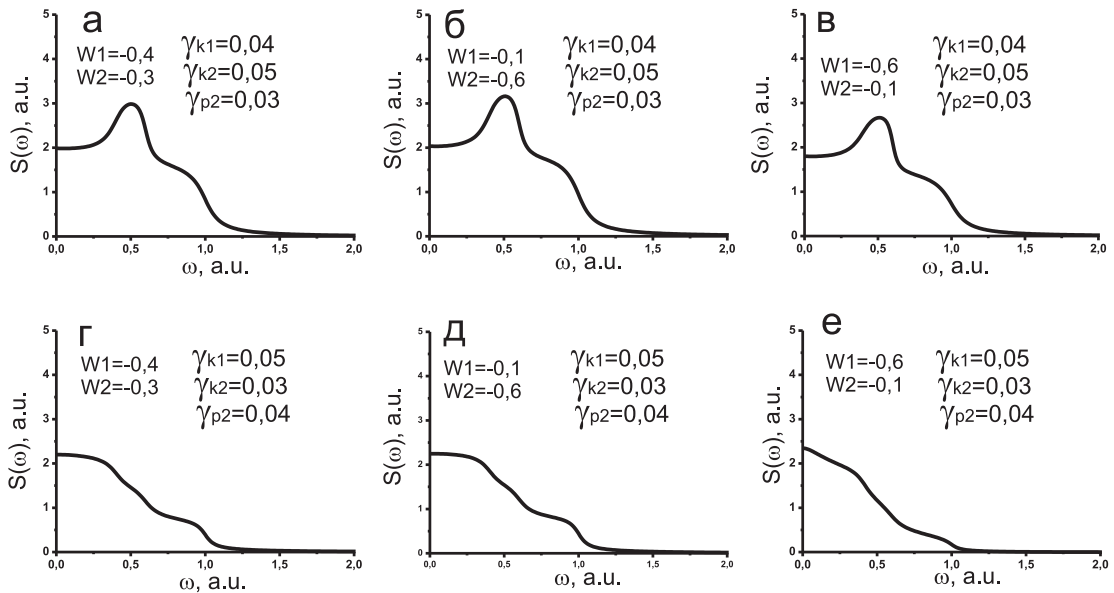


Рис. 3.21. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух отрицательно заряженных локализованных состояний в туннельном контакте. а)-в) $\epsilon_1 = 1$, $eV = \epsilon_2 = 0,6$, $T = 0,01$, г)-е) $\epsilon_1 = 0,6$, $eV = \epsilon_2 = 1$, $T = 0,01$.

Таким образом, исследование спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений в случае нерезонансного туннелирования между локализованными состояниями в области туннельного контакта позволяет не только определить зарядовое состояние примесного атома по низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока ($1/f^\alpha$), но и дает возможность напрямую определять тип примесного атома по положению сингулярного пика, появляющегося на частоте, определяемой уровнем энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом.

§ 3.4. Сдвиг низкочастотных сингулярных особенностей в спектре туннельного тока в высокочастотную область при туннелировании через зарядовые локализованные состояния

При исследовании статистических свойств и кинетики туннельных процессов в присутствии зарядовых локализованных состояний в области туннельного контакта в спектральной плотности туннельного тока может происходить формирование нескольких высокочастотных особенностей [279]. Этот эффект связан с нерезонансным туннелированием электронов между берегами туннельного контакта через оба локализованных состояния. Нерезонансное туннелирование может иметь место, когда оба находящихся в области туннельного контакта локализованных состояния образованы примесными атомами на поверхности, а локализованное состояние на острие СТМ отсутствует. Другой возможной реализацией, для которой туннелирование электронов происходит нерезонансным образом, является ситуация, когда одно из локализованных состояний образовано примесным атомом, а локализованное на острие СТМ состояние не совпадает по энергии с уровнем Ферми зонда [280,281]. Вторым вариантом является наиболее вероятным в экспериментах с использованием сканирующей туннельной микроскопии. Поэтому далее в этом разделе будем везде считать, что одно из локализованных состояний образовано примесным атомом, а второе сформировано ближайшей к поверхности группой атомов на острие зонда СТМ. Рассмотрим случае, когда выполнено условие: $eV \neq \varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$.

Используя выражение (3.25) для спектральной плотности туннельного тока без учета кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами в берегах туннельного контакта,

исследуем спектральные зависимости при всех возможных для двух примесных атомов взаимных расположениях энергетических уровней локализованных состояний в туннельном контакте.

Рассмотрим случаи, когда выполнены соотношения: $\varepsilon_1 > \varepsilon_2 > eV$ (рис. 3.22 а-в) и $\varepsilon_2 > \varepsilon_1 > eV$ (рис. 3.22 г-е). Представленные зависимости демонстрируют, что при стремлении частоты к нулю амплитуда низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине для любых значений параметров туннельного контакта. Величина амплитуды спектральной плотности на нулевой частоте превосходит величину на частотах отличных от нуля.

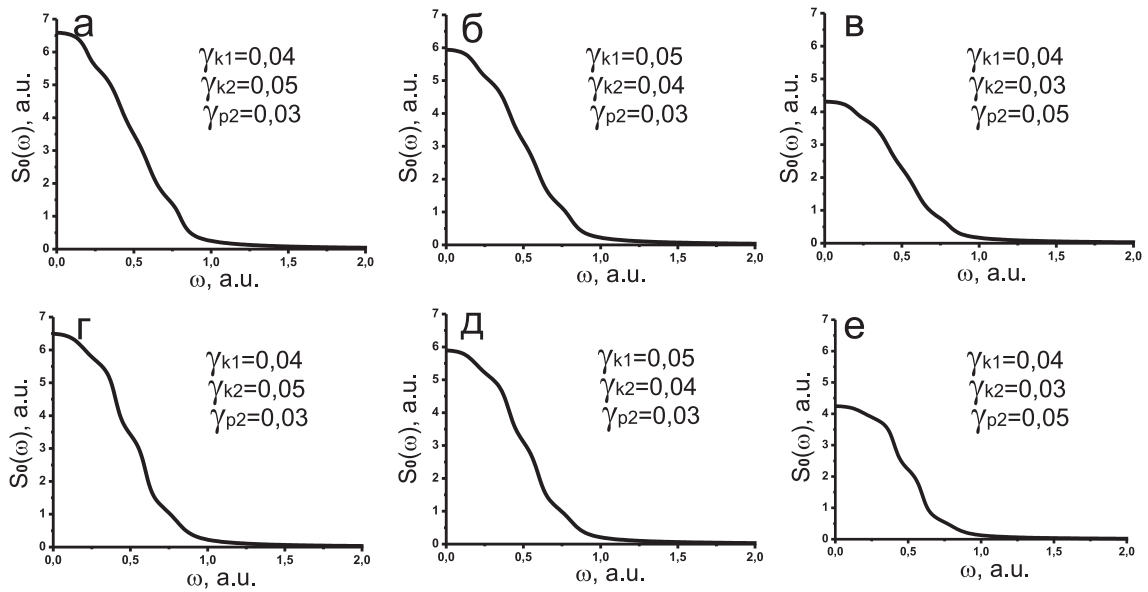


Рис. 3.22. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия для различных значений скоростей переходов в туннельном контакте. а)-в) $\varepsilon_1 = 0,6$, $\varepsilon_2 = 0,8$, $eV = 1$, $T = 0,01$, г)-е) $\varepsilon_1 = 0,8$, $\varepsilon_2 = 0,6$, $eV = 1$, $T = 0,01$.

Аналогичное поведение зависимостей спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами проводимости наблюдается для следующих случаев, когда:

- уровень энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом, расположен по энергии выше величины напряжения смещения на туннельном контакте, а уровень энергии локализованного на острие СТМ состояния расположен по энергии ниже величины напряжения смещения на туннельном контакте: $\varepsilon_1 > eV > \varepsilon_2$ (рис. 3.23 а-в).

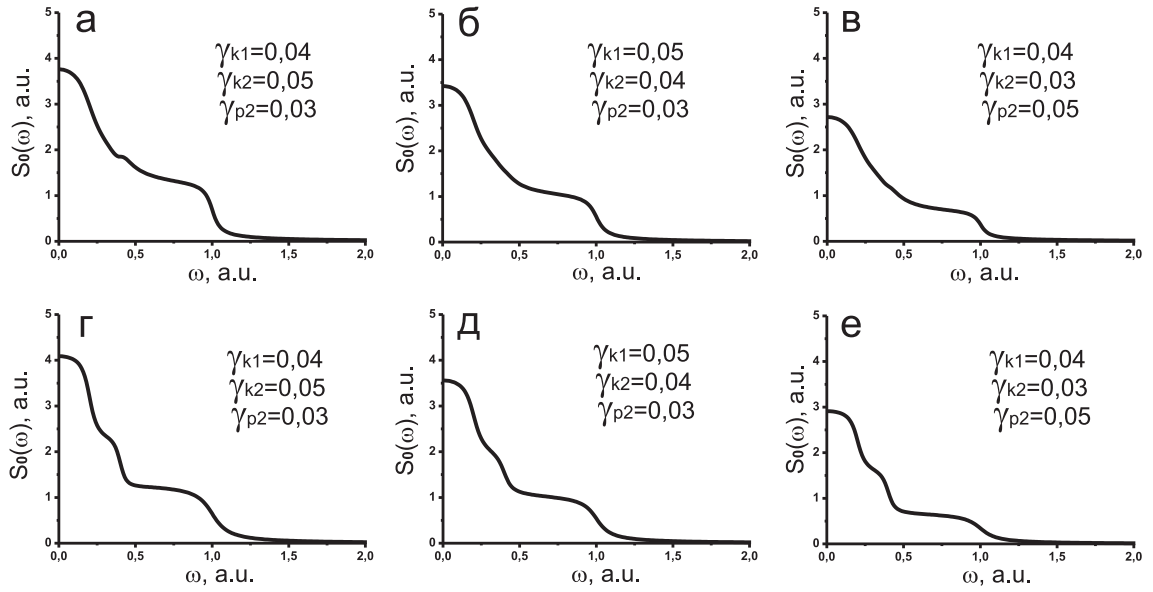


Рис. 3.23. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия для различных значений скоростей переходов в туннельном контакте. а)-в) $\varepsilon_1 = 0,4$, $\varepsilon_2 = 1$, $eV = 0,6$, $T = 0,01$, г)-е) $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 0,4$, $eV = 0,6$, $T = 0,01$.

- уровень энергии локализованного состояния на острие СТМ расположен по энергии выше величины напряжения смещения на туннельном контакте, а уровень энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом, расположен по энергии ниже величины напряжения смещения на туннельном контакте: $\varepsilon_2 > eV > \varepsilon_1$ (рис. 3.23 г-е).

Пусть уровни энергий обоих локализованных состояний расположены по энергии ниже величины напряжения смещения на туннельном контакте: $eV > \varepsilon_1 > \varepsilon_2$ (рис. 3.24 а-в) и $eV > \varepsilon_2 > \varepsilon_1$ (рис. 3.24 г-е).

В этих случаях значение амплитуды спектральной плотности туннельного тока на нулевой частоте не является наибольшим. С ростом частоты происходит увеличение значения амплитуды спектральной плотности туннельного тока с последующим достижением максимального значения. При дальнейшем увеличении частоты происходит уменьшение значения амплитуды спектральной плотности туннельного тока. В окрестности разностной частоты, соответствующей разности значения энергии уровня локализованного состояния, образованного примесным атомом, и величины приложенного к туннельному контакту напряжения ($eV - \varepsilon_1$) в спектральной плотности туннельного тока наблюдается провал.

Таким образом, в отсутствии кулоновского взаимодействия в спек-

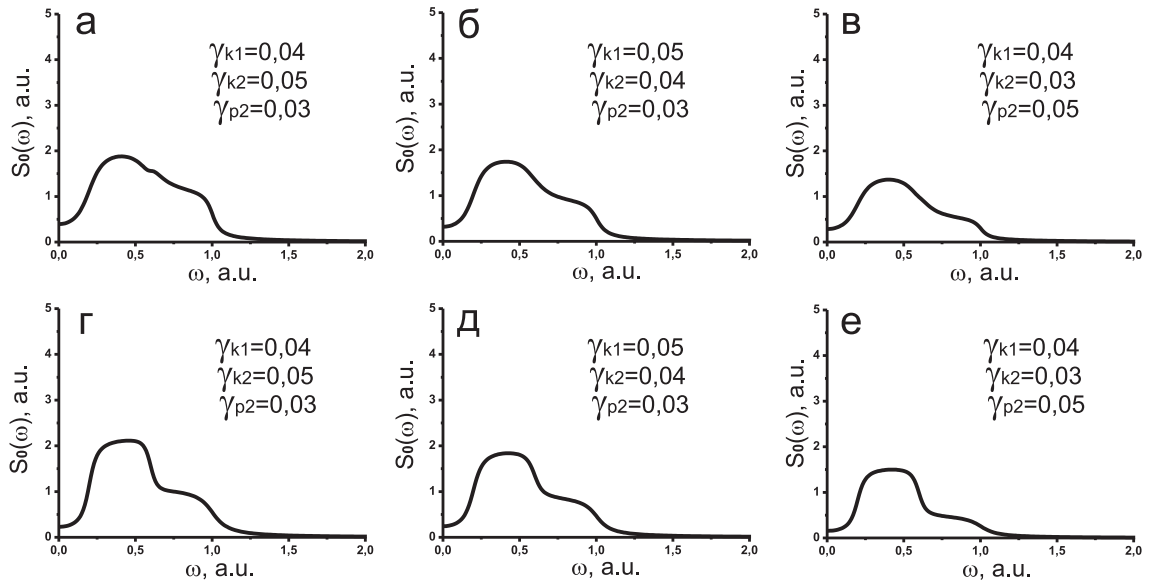


Рис. 3.24. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты без учета кулоновского взаимодействия для различных значений скоростей переходов в туннельном контакте. а)-в) $\varepsilon_1 = 0,6$, $\varepsilon_2 = 1$, $eV = 0,4$, $T = 0,01$, г)-е) $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 0,6$, $eV = 0,4$, $T = 0,01$.

тральной плотности туннельного тока не возникает сингулярных особенностей во всем диапазоне напряжений смещения на туннельном контакте. Однако, даже без учета кулоновского взаимодействия вид спектральной плотности туннельного тока значительно зависит от положения уровней энергии локализованных в области туннельного контакта состояний, в отличие от случая резонансного туннелирования.

Учет кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта приводит к значительному изменению вида зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты. Спектры туннельного тока для случая нерезонансного туннелирования через локализованные состояния при различном взаимном расположении уровней энергии представлены на рис. **3.25**.

Полученные спектральные зависимости демонстрируют, что при стремлении частоты к нулю амплитуда низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине. В высокочастотной области спектра учет кулоновского взаимодействия приводит к формированию пиков на частотах, соответствующих разности энергий уровней каждого из локализованных состояний и величины приложенного напряжения к туннельному контакту. Появление пиков обусловлено сингулярным поведением спектральной плотности туннельного то-

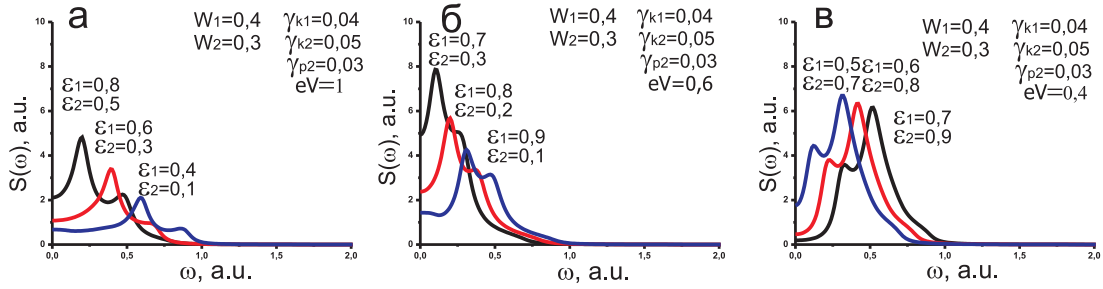


Рис. 3.25. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия для различных положений уровней энергии локализованных состояний. $T = 0,01$.

ка на разностных частотах. Таким образом, перенормировка амплитуд переходов в туннельном контакте при учете кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра в случае нерезонансного туннелирования приводит к сдвигу сингулярных особенностей в высокочастотную область спектров туннельного тока.

Отсутствие сингулярной особенности в спектре туннельного тока в окрестности нулевой частоты при наличии в системе кулоновского взаимодействия, характерное только для случая нерезонансного туннелирования электронов через локализованные состояния, дает принципиальную возможность для определения типа электронного транспорта в рассматриваемой системе (резонансное или нерезонансное туннелирование). При этом можно ограничиться измерениями только низкочастотной составляющей спектра туннельного тока в узком диапазоне частот.

Исследуем поведение спектральной плотности туннельного тока при различных величинах энергий кулоновского взаимодействия и различных параметрах туннельного контакта. Рассмотрим случай, когда оба локализованных состояния имеют положительный заряд (рис. 3.26).

Представленные зависимости позволяют сделать следующий вывод: при любых параметрах туннельного контакта и любых соотношениях между энергиями кулоновского взаимодействия для положительно заряженных локализованных состояний спектральные зависимости демонстрируют отсутствие сингулярностей в низкочастотной области спектра туннельного тока. В высокочастотной области наблюдаются пики на разностных частотах. Амплитуды пиков зависят не только от величин матричных элементов туннельных переходов электронов в области контакта, но и от соотношений между величинами энергий кулоновского взаимодействия зарядовых

локализованных состояний с электронами непрерывного спектра, что позволяет использовать предложенную модель для определения зарядового состояния обоих локализованных состояний одновременно.

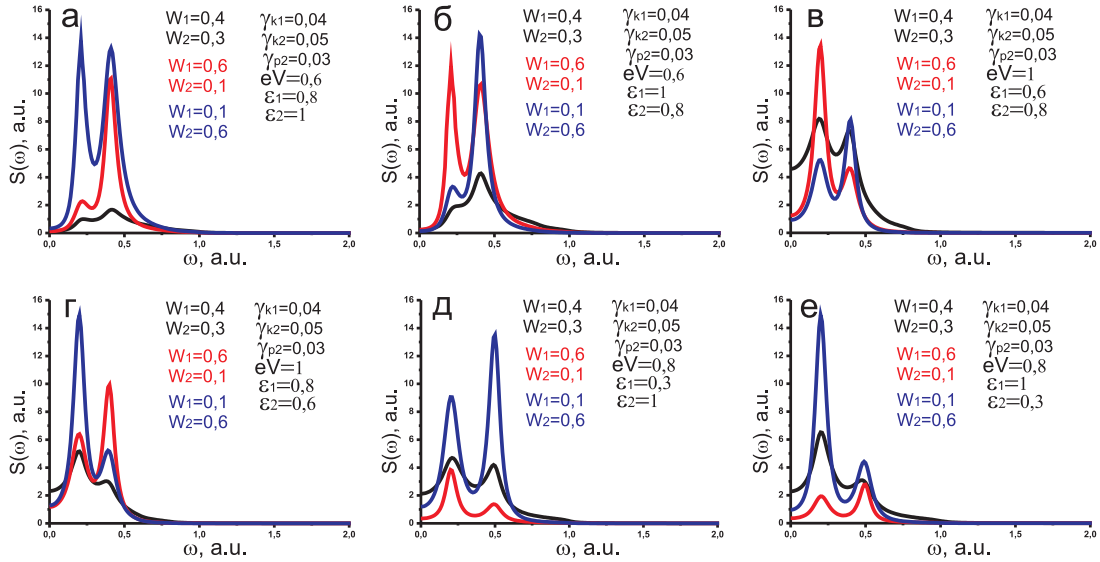


Рис. 3.26. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях параметров туннельного контакта и энергиях кулоновского взаимодействия. $T = 0,01$.

Когда энергия кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на острие зонда СТМ с электронами непрерывного спектра значительно превосходит энергию кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами непрерывного спектра, то амплитуда пика на частоте, соответствующей разности значений энергии уровня локализованного состояния, образованного примесным атомом, и величины напряжения на туннельном контакте превосходит амплитуду пика на частоте, соответствующей разности значений энергии уровня локализованного на острие СТМ состояния и величины напряжения на туннельном контакте при любых значениях параметров туннельного контакта.

Если энергия кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния на острие зонда СТМ с электронами непрерывного спектра значительно меньше энергии кулоновского взаимодействия зарядового локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами непрерывного спектра, то амплитуда пика на частоте, соответствующей разности значений энергии уровня локализованного на острие СТМ состояния и величины напряжения на туннельном контакте, превосходит ампли-

туду пика на частоте, соответствующей разности значений энергии уровня локализованного состояния, образованного примесным атомом, и величины напряжения на туннельном контакте при любых значениях параметров туннельного контакта.

Исследуем спектры туннельного тока (в двойном логарифмическом масштабе) для различных соотношений между величинами энергий кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра. С целью нахождения областей частот, для которых каждое из слагаемых, дающих сингулярный вклад в спектральную плотность туннельного тока, определяемый кулоновским взаимодействием, наилучшим образом аппроксимирует спектральную зависимость, построим полные туннельные спектры и каждое из слагаемых по отдельности, учитывающих кулоновское взаимодействие для фиксированного набора параметров (рис. 3.27).

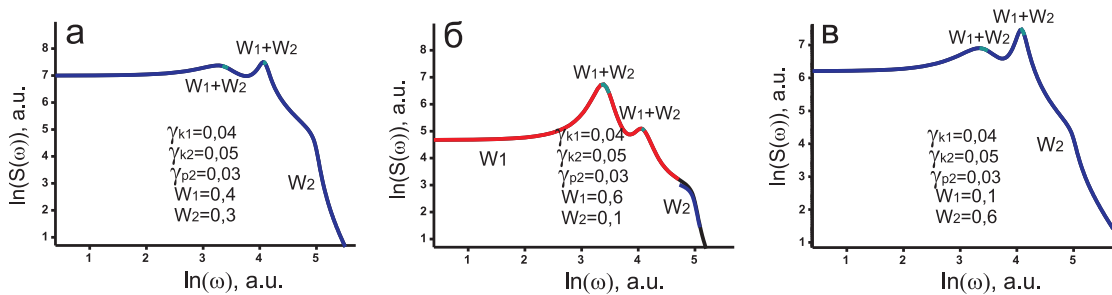


Рис. 3.27. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода и различных соотношениях между энергиями кулоновского взаимодействия в туннельном контакте в двойном логарифмическом масштабе. $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 0,4$, $eV = 0,6$, $T = 0,01$

Полученные зависимости позволяют сделать следующий вывод: в окрестности разностных частот, соответствующих разности значений энергий уровней каждого из локализованных состояний и величины напряжения смещения на туннельном контакте, для любых значений параметров туннельного контакта и при любых соотношениях между кулоновскими энергиями спектральная плотность туннельного тока определяется слагаемым, дающим наиболее сильную сингулярную расходимость, обусловленную суммарной энергией кулоновского взаимодействия двух зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра.

Для близких величин энергий кулоновского взаимодействия и в случае, когда величина энергии кулоновского взаимодействия состояния локализованного на острие СТМ с электронами непрерывного спектра превос-

ходит величину энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами проводимости для любых значений параметров туннельного контакта спектр туннельного тока (за исключением окрестностей разностных частот) может быть аппроксимирован наилучшим образом слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного на острие зонда СТМ состояния с электронами в состояниях непрерывного спектра (рис. **3.27 а,в**).

В случае, когда величина энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами непрерывного спектра превосходит величину энергии кулоновского взаимодействия состояния локализованного на острие СТМ с электронами проводимости для любых значений параметров туннельного контакта спектр туннельного тока (за исключением окрестностей разностных частот) может быть аппроксимирован наилучшим образом слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного состояния, образованного примесным атомом, с электронами в состояниях непрерывного спектра. В высокочастотной области спектр туннельного тока может быть наилучшим образом аппроксимирован слагаемым, зависящим от энергии кулоновского взаимодействия локализованного на острие СТМ состояния с электронами в состояниях непрерывного спектра (рис. **3.27 б**).

Рассмотрим случай, когда локализованные состояния в туннельном контакте имеют заряды разных знаков. Зависимости спектральной плотности туннельного тока в линейном и в двойном логарифмическом масштабе представлены на рис. **3.28**.

Спектральные зависимости показывают, что учет кулоновского взаимодействия между зарядовыми локализованными состояниями и электронами проводимости в состояниях непрерывного спектра приводит к появлению сингулярных пиков на частотах, соответствующих разности значений энергий уровней каждого из локализованных состояний и величины приложенного напряжения к туннельному контакту для случая локализованных состояний с зарядами разных знаков. При стремлении частоты к нулю значение амплитуды низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока стремится к постоянной величине, то есть отсутствует сингулярное поведение в окрестности нулевой частоты.

Спектры туннельного тока (в двойном логарифмическом масштабе рис. **3.28**) для различных величин энергий кулоновского взаимодействия

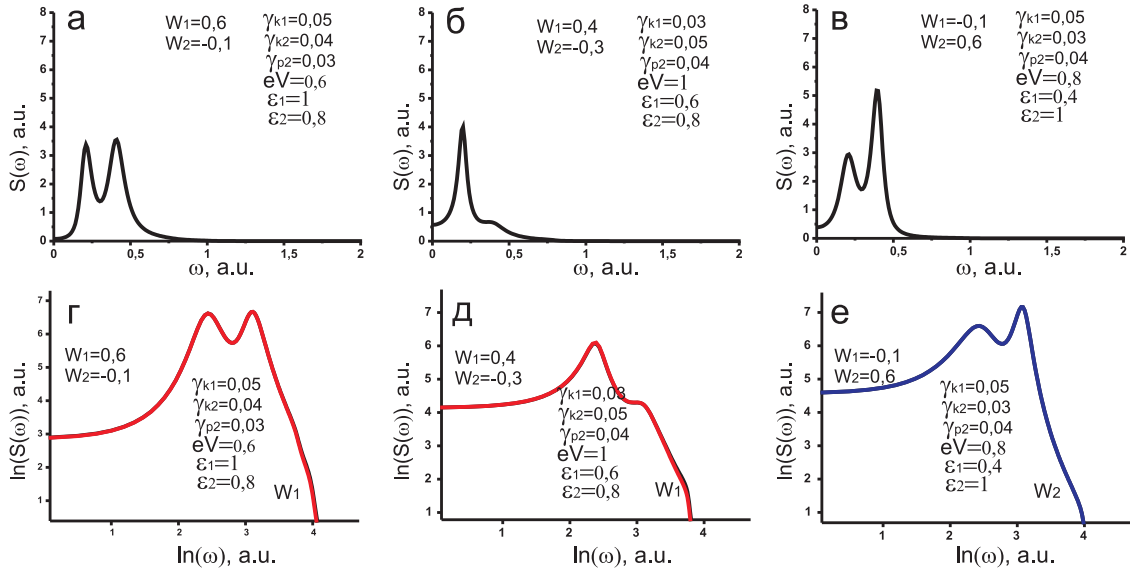


Рис. 3.28. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для локализованных состояний с зарядами разных знаков в линейном масштабе и в двойном логарифмическом масштабе. $T = 0,01$.

позволяют сделать вывод: при наличии в области туннельного контакта локализованных состояний с зарядами разных знаков, для любых параметров туннельного контакта спектры туннельного тока наилучшим образом могут быть аппроксимированы слагаемым, зависящим от наибольшей по величине энергии кулоновского взаимодействия одного из зарядовых локализованных состояний с электронами в состояниях непрерывного спектра.

Когда оба локализованных состояния имеют заряды отрицательных знаков (рис. 3.29), спектры туннельного тока демонстрируют подавление сингулярных пиков на разностных частотах, соответствующих разности значений величин энергий каждого из уровней локализованных состояний и величины приложенного напряжения к туннельному контакту.

Таким образом, предложенная для описания микроскопической природы сингулярного поведения спектральной плотности туннельного тока теоретическая модель является универсальной, поскольку дает принципиальную возможность как для определения типа примесного атома и его зарядового состояния, так и для анализа локализованного состояния на острие зонда СТМ. Кроме того, данная модель позволяет определить каким образом происходит электронный туннельный транспорт через связанные локализованные состояния: за счет резонансного или нерезонансного туннелирования.

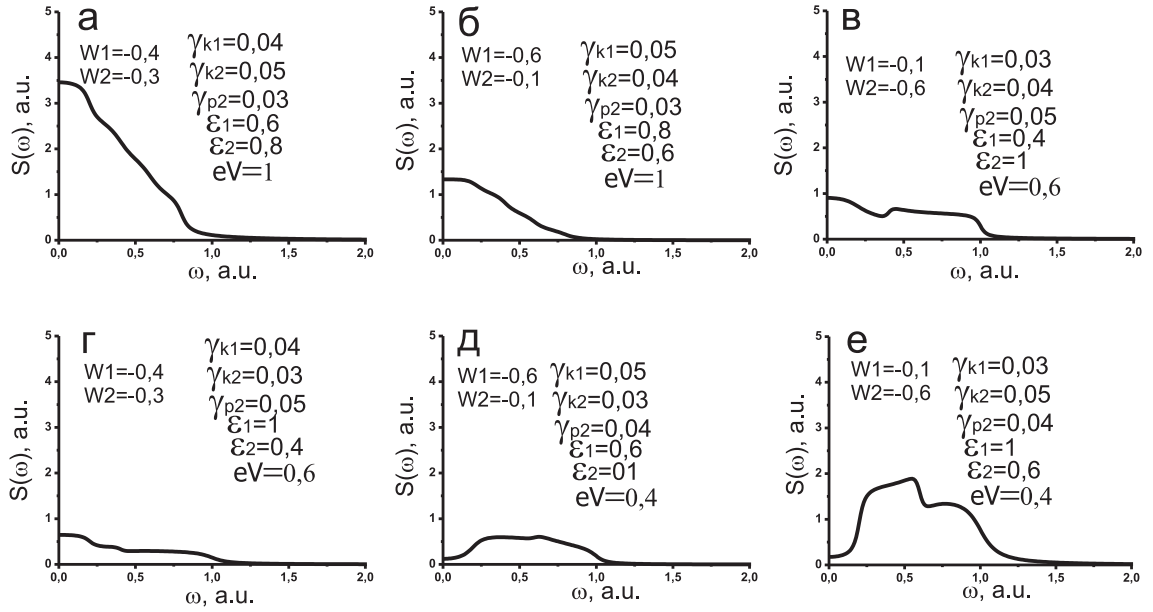


Рис. 3.29. Зависимости спектральной плотности туннельного тока от частоты с учетом кулоновского взаимодействия при различных значениях скоростей перехода для двух отрицательно заряженных локализованных состояний в туннельном контакте. $T = 0,01$.

§ 3.5. Выводы

Предложена теоретическая модель, позволяющая объяснить микроскопическую природу низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, возникающего в окрестности зарядовых локализованных состояний на поверхности полупроводников, и исследовать особенности спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Разработанная модель позволяет создать методику для диагностики типов и зарядовых состояний примесных атомов, расположенных в подповерхностных слоях полупроводниковых кристаллов, а также проанализировать особенности локализованного состояния на острие зонда СТМ.

1. Предложена теоретическая модель, учитывающая эффекты многократного рассеяния электронов проводимости на включающемся кулоновском потенциале, вызванном изменением заряда локализованного состояния в области туннельного контакта в процессе туннелирования электронов. Данная модель позволяет на микроскопическом уровне объяснить сингулярное поведение низкочастотной составляющей спектральной плотности шума туннельного тока вида $1/f^\alpha$. Рассмотрены случаи как резонансного, так и нерезонансного туннелирования через зарядовые локализованные состояния в области туннельного контакта.

2. Представленная модель позволяет объяснить зависимость показателя степени низкочастотной составляющей спектра туннельного тока от зарядового состояния примесного атома, обнаруженную при экспериментальном исследовании локальных спектров туннельного тока над индивидуальными примесными атомами методом СТМ/СТС. Рассмотренная модель дает хорошее качественное и количественное соответствие теоретических расчетов с экспериментальными результатами [276, 277].
3. Обнаружено, что учет кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра в случае резонансного туннелирования электронов из локализованного состояния острия в состояния непрерывного спектра зонда и нерезонансного туннелирования электронов между локализованными состояниями приводит к сингулярному поведению низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока и к формированию сингулярного высокочастотного пика на разностной частоте, соответствующей разности значений величин энергий уровней локализованных состояний.

Таким образом, исследование спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений в случае нерезонансного туннелирования позволяет не только определить зарядовое состояние примесного атома по низкочастотной составляющей спектральной плотности туннельного тока ($1/f^\alpha$), но и дает возможность напрямую определять тип примесного атома по положению сингулярного пика, появляющегося на частоте, определяемой уровнем энергии локализованного состояния, образованного примесным атомом.

4. Показано, что учет кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состояний с электронами непрерывного спектра в случае, когда туннелирование электронов между берегами туннельного контакта через локализованные состояния происходит нерезонансным образом, приводит к формированию высокочастотных пиков на частотах, соответствующих разности значений величин энергий уровней каждого из локализованных состояний и величины приложенного напряжения к туннельному контакту. Таким образом, обнаружено, что учет кулоновского взаимодействия зарядовых локализованных состо-

яний с электронами непрерывного спектра в случае нерезонансного туннелирования приводит к сдвигу сингулярных особенностей в высокочастотную область спектров туннельного тока.

5. Предложенная теоретическая модель позволяет создать методику для определения типа и зарядового состояния примесных атомов, расположенных в подповерхностных слоях полупроводниковых кристаллов. Кроме того, исследуя только низкочастотную составляющую спектральной плотности туннельного тока, можно сделать вывод о типе электронного транспорта в связанных локализованных состояниях. Наличие сингулярной особенности в спектре туннельного тока в окрестности нулевой частоты свидетельствует о том, что электроны туннелируют через систему резонансным образом, а ее отсутствие говорит о нерезонансном характере туннельных процессов.

ГЛАВА 4

Кулоновские корреляции при туннелировании через примесные комплексы и систему сильно связанных квантовых точек

§ 4.1. Основные кинетические уравнения для неравновесной электронной плотности в системе с двумя уровнями энергии

Исследование туннельных характеристик взаимодействующих примесных комплексов или связанных квантовых точек в присутствии кулоновских корреляций локализованных электронов является одной из наиболее актуальных проблем физики наноструктур. Интерес к таким структурам обусловлен их привлекательностью как с технологической и инженерной точек зрения для создания современных устройств наноэлектроники, так и с точки зрения исследования таких фундаментальных физических явлений, как: многочастичные кулоновские и электрон-фононные корреляции, модификация локальной электронной структуры вблизи локализованных состояний, нестационарная релаксация заряда и неравновесный электронный транспорт. Неравновесные кулоновские корреляции, имеющие определяющее значение в структурах сверхмалых размеров, могут приводить к значительному перераспределению локального заряда в туннельных контактах сверхмалого размера в окрестности примесных состояний [151]. В некотором смысле эти эффекты аналогичны явлению ко-туннелирования, рассмотренному в работах [155, 156, 282]. Кулоновское взаимодействие вызывает изменение чисел заполнения локализованных состояний, образованных примесными атомами, и проявляется на вольт-амперных характеристиках, измеренных в их окрестности. Изменяя параметры туннельного контакта, можно получить области напряжений на туннельном контакте, в которых наблюдается отрицательная туннельная проводимость, обусловленная кулоновскими корреляциями [154, 188].

Анализ неравновесных эффектов и особенностей туннельных харак-

теристик для слабо связанных примесных состояний (амплитуда туннельных переходов между уровнями энергии примесных состояний меньше амплитуд туннельных переходов между примесными состояниями и состояниями непрерывного спектра) с кулоновским взаимодействием был выполнен с использованием диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов [67, 144]. В таких системах величина кулоновских корреляций обычно полагается много меньшей или много большей [181, 182], чем масштаб энергии, определяемый расстоянием между примесными уровнями энергии. Однако, существует несколько экспериментальных реализаций, для которых величина кулоновского взаимодействия по порядку величины сравнима с расстоянием между одноэлектронными уровнями. Это условие выполняется в том случае, если расстояние между примесными атомами сопоставимо по величине с постоянной решетки подложки. В этом случае образуется сильно связанный примесный комплекс, для которого величина связи между примесями значительно превосходит величину связи каждого из локализованных состояний с состояниями подложки.

Другой возможной экспериментальной реализацией является квантовая точка с несколькими уровнями энергии или несколько связанных одноуровневых квантовых точек, слабо взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра подложки [159, 160]. Такие системы можно описать моделью нескольких электронных уровней с кулоновскими корреляциями локализованных электронов. В рассматриваемых системах можно ожидать, что кулоновские корреляции будут модифицировать пространственное распределение локализованного заряда, что позволит осуществлять манипуляции электронной плотностью, изменяя геометрию системы и, тем самым, варьируя величину кулоновских корреляций [157, 283, 284].

Основная масса исследований в этой области посвящена системам связанных квантовых точек, в которых не может одновременно находиться более двух электронов [181, 187, 190]. На системы с большим количеством электронов накладываются дополнительные ограничения на состояния в берегах туннельного контакта, которые предполагаются спинполяризованными [188] или ферромагнитными [182, 189, 190]. Даже с такими специфическими ограничениями очень редко удается получить области с отрицательной туннельной проводимостью для выделенного набора параметров системы.

Таким образом, отсутствуют комплексные исследования туннельной

проводимости в зависимости от величин амплитуд туннельных переходов, от величины и знака расстройки между уровнями энергии, от положения уровней энергии относительно уровня Ферми, от величины кулоновских корреляций. Отсутствуют модели, которые можно было бы использовать для описания реальных систем. То есть модели, где величину кулоновских корреляций можно изменять в широком диапазоне, чтобы величина кулоновского взаимодействия была сопоставима с расстоянием между уровнями энергий в квантовых точках.

Исследуем процессы туннелирования через двухуровневую систему с кулоновскими корреляциями между электронами, локализованными на энергетических уровнях ε_1 и ε_2 (рис.4.1).

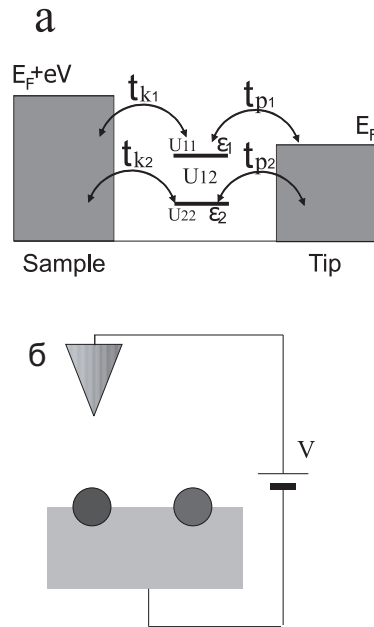


Рис. 4.1. а) Энергетическая диаграмма двухуровневой системы. б) Схематическое изображение экспериментальной реализации рассматриваемой модели.

В такой системе могут одновременно находиться от одного до четырех электронов. Рассмотрим туннелирование электронов при условии, что в системе могут образовываться многочастичные состояния и исследуем особенности, возникающие в туннельной проводимости в зависимости от величин амплитуд туннельных переходов, от величины и знака расстройки между уровнями энергии, от положения уровней энергии относительно уровня Ферми и от величины кулоновских корреляций, тогда гамильтониан будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + \sum_{ij\sigma\sigma'} U_{ij}^{\sigma\sigma'} n_{i\sigma} n_{j\sigma'} + \\
& + \sum_{ki\sigma} t_{ki} (c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma} + h.c.) + \sum_{pi\sigma} t_{pi} (c_{p\sigma}^+ c_{i\sigma} + h.c.)
\end{aligned} \quad (4.1)$$

Индексы k и p описывают состояния непрерывного спектра в левом (полупроводник) и правом (острие) берегах туннельного контакта соответственно. $t_{k(p)i}$ - амплитуда туннельных переходов между состояниями непрерывного спектра и локализованным состоянием с энергией ε_i . Операторы $c_{k(p)+}/c_{k(p)}$ соответствуют рождению/уничтожению электронов в состояниях непрерывного спектра $k(p)$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ - электронные числа заполнения двухуровневой системы, где $c_{i\sigma}$ - оператор уничтожения электронов со спином σ на уровне ε_i . $U_{ij}^{\sigma\sigma'}$ - величины кулоновского взаимодействия локализованных электронов.

Туннельный ток, протекающий через рассматриваемую систему, можно определить с помощью формализма вторичного квантования следующим образом:

$$I = I_{k\sigma} = \sum_{i\sigma} I_{ki\sigma} = \sum_{k\sigma} \dot{n}_{k\sigma} = \sum_{ki\sigma} t_{ki} (\langle c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle - \langle c_{i\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle) \quad (4.2)$$

Далее везде будем полагать $\hbar = 1$. Тогда кинетическое уравнение движения для произведения операторов вторичного квантования электронов $c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma}$, определяющих величину протекающего через систему туннельного тока, имеет вид:

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma}}{\partial t} = & (\varepsilon_i - \varepsilon_k) \cdot c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma} + U_{ii} n_{i-\sigma} \cdot c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma} + \\
& + U_{ij} (n_{j\sigma} + n_{j-\sigma}) \cdot c_{k\sigma}^+ c_{i\sigma} - t_{ki} \cdot (n_{i\sigma} - \hat{f}_k) + \\
& + \sum_{k' \neq k} t_{k'i} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + \sum_{i \neq j} t_{kj} c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} = 0
\end{aligned} \quad (4.3)$$

где введено следующее обозначение:

$$\hat{f}_k = c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \quad (4.4)$$

Учтем, что выполняются следующие соотношения для операторов чисел заполнения: $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$ и $n_{i\sigma}(1 - n_{i\sigma}) = 0$. Тогда получим выражение для

произведения $c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma}$. Для этого необходимо поочередно домножать уравнение (4.3) на комбинации операторов электронных чисел заполнения $n_{i(j)\pm\sigma}$:

$$\begin{aligned} & (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} & n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + U_{11}\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma'} n_{2\sigma'}(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma'})c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \sum_{\sigma'} \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot n_{2\sigma'}(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma'})\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + U_{12}\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma'} n_{1-\sigma} n_{2\sigma'}(1 - n_{2-\sigma'})c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \sum_{\sigma'} \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot n_{1-\sigma} n_{2\sigma'}(1 - n_{2-\sigma'})\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + U_{11} + U_{12}\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} & n_{2-\sigma} n_{2\sigma}(1 - n_{1-\sigma})c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot n_{2-\sigma} n_{2\sigma}(1 - n_{1-\sigma})\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + 2U_{12}\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} & n_{1-\sigma} n_{2-\sigma} n_{2\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{1\sigma} = \\ & = \{(t_{k1} \cdot (n_{1\sigma} - \hat{f}_k) + \sum_{k' \neq k} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} + t_{k2} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) \cdot \\ & \cdot n_{1-\sigma} n_{2-\sigma} n_{2\sigma}\} \cdot \{\varepsilon_1 - \varepsilon_k + U_{11} + 2U_{12}\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.10)$$

При этом для операторов электронных чисел заполнения выполнено следующее соотношение:

$$\begin{aligned}
& (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) + n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) + \\
& + \sum_{\sigma'} n_{2\sigma'}(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma'}) + \sum_{\sigma'} n_{1-\sigma}n_{2\sigma'}(1 - n_{2-\sigma'}) + \\
& + n_{2-\sigma}n_{2\sigma}(1 - n_{1-\sigma}) + n_{1-\sigma}n_{2-\sigma}n_{2\sigma} = 1 \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Пренебрегая изменениями электронного спектра и локальной плотности состояний в берегах туннельного контакта при протекании туннельного тока, не будем учитывать корреляции локализованных электронов на примесном кластере и электронов проводимости в берегах туннельного контакта. Такое приближение означает, что мы пренебрегаем шириной уровней энергии по сравнению с величинами напряжения на туннельном контакте и величинами кулоновского взаимодействия. Таким образом в данном методе не может быть получен и исследован эффект Кондо. С другой стороны, данное приближение позволяет точно учесть корреляции локализованных электронов во всех порядках по величине кулоновского взаимодействия.

Суммируя правые и левые части уравнений (4.5)-(4.10), получим уравнение для величины $\langle c_{k\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$, которое после суммирования по k позволяет получить выражение для туннельного тока, протекающего через двухуровневую систему. Полный туннельный ток определяется суммой двух токов (тока, протекающего через уровень энергии 1 и тока, протекающего через уровень энергии 2):

$$I_{k\sigma} = I_{k1\sigma} + I_{k2\sigma} \quad (4.12)$$

где выражение для туннельного тока $I_{k2\sigma}$ можно получить заменой индексов $1 \leftrightarrow 2$ в выражении для туннельного тока $I_{k1\sigma}$, которое имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
I_{k1\sigma} = & \Gamma_{k1} \{ \langle n_{1\sigma} \rangle - \langle (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) \rangle \} f_k(\varepsilon_1) - \\
& - \langle n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11}) - \\
& - \langle n_{2\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{1-\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{12}) - \\
& - \langle n_{2-\sigma}(1 - n_{2\sigma})(1 - n_{1-\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{12}) - \\
& - \langle n_{1-\sigma}n_{2\sigma}(1 - n_{2-\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}) - \\
& - \langle n_{1-\sigma}n_{2-\sigma}(1 - n_{2\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}) -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \langle n_{2\sigma} n_{2-\sigma} (1 - n_{1-\sigma}) \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + 2U_{12}) - \\
& - \langle n_{1-\sigma} n_{2-\sigma} n_{2\sigma} \rangle \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11} + 2U_{12}) \} + \\
& + t_{k1} t_{k2} \nu_{0k} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma} + \sum_{k' \neq k} \langle t_{k1} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma} \rangle \cdot \\
& \cdot \left\{ \left\langle \frac{(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k} \right\rangle + \right. \\
& + \left\langle \frac{n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma})}{\varepsilon_1 + U_{11} - \varepsilon_k} \right\rangle + \\
& + \left\langle \frac{\sum_{\sigma'} n_{2\sigma'} (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma'})}{\varepsilon_1 + U_{12} - \varepsilon_k} \right\rangle + \\
& + \left\langle \frac{\sum_{\sigma'} n_{1-\sigma} n_{2\sigma'} (1 - n_{2-\sigma'})}{\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12} - \varepsilon_k} \right\rangle + \\
& \left. + \left\langle \frac{n_{2-\sigma} n_{2\sigma} (1 - n_{1-\sigma})}{\varepsilon_1 + 2U_{12} - \varepsilon_k} \right\rangle + \left\langle \frac{n_{1-\sigma} n_{2-\sigma} n_{2\sigma}}{\varepsilon_1 + U_{11} + 2U_{12} - \varepsilon_k} \right\rangle \right\} \quad (4.13)
\end{aligned}$$

Далее будем пренебрегать членами $t_{k1} t_{k2} \nu_{0k} c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}$ и членами пропорциональными $\frac{t_{k1} t_{k'1} c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_k}$ в выражении (4.13), так как эти члены соответствуют следующему порядку малости теории возмущений по параметру $\frac{\Gamma_i}{\varepsilon_i}$. Скорости релаксации $\Gamma_{k(p)i} = \pi \cdot t_{k(p)i}^2 \cdot \nu_0$ определяются амплитудами туннелирования электронов из двухуровневой системы в состояния непрерывного спектра берегов туннельного контакта k (образец) и p (острие зонда СТМ). $\nu_{0k(p)}$ -плотность состояний непрерывного спектра.

Выражение для туннельного тока (4.13) содержит средние значения электронных чисел заполнения $n_{i\sigma}$, парные и тройные корреляторы для чисел заполнения локализованных состояний, которые необходимо вычислить для анализа распределения заряда в двухуровневой системе и для исследования ее туннельных характеристик. Уравнения для полных электронных чисел заполнения $n_{1\sigma}$ и $n_{2\sigma}$ на уровнях энергии 1 и 2 могут быть получены из следующих условий:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial n_{1\sigma}}{\partial t} &= I_{k1\sigma} + I_{p1\sigma} = 0 \\
\frac{\partial n_{2\sigma}}{\partial t} &= I_{k2\sigma} + I_{p2\sigma} = 0
\end{aligned} \quad (4.14)$$

где выражение для туннельного тока $I_{pi\sigma}$ можно получить из выражения для тока $I_{ki\sigma}$ заменой индексов $k \leftrightarrow p$.

Таким образом, предложенный метод анализа многоуровневых систем с кулоновскими корреляциями позволяет получить самосогласован-

ную замкнутую систему уравнений, для электронных чисел заполнения и корреляторов всех порядков по величине кулоновского взаимодействия. Это не только позволяет исследовать системы, в которых кулоновское взаимодействие является самым большим или самым малым параметром в системе, но и дает возможность анализировать системы, в которых величина кулоновского взаимодействия сопоставима с величинами характерных энергетических параметров (расстоянием между уровнями энергий, величиной связи системы с берегами туннельного контакта). В предложенном методе впервые точно вычислены корреляторы всех порядков для локализованных электронов, а корреляции локализованных электронов с электронами проводимости в состояниях непрерывного спектра учтены в низшем порядке теории возмущений по взаимодействию.

Далее рассмотрим применение предложенного метода для конкретных электронных систем. Рассмотрим случай, когда величина кулоновского взаимодействия достаточно велика и значительно превосходит величины других энергетических параметров системы $U_{ij} \gg \varepsilon_{i(j)}$. Это условие выполнено в квантовых точках с характерными энергиями уровней порядка 1 эВ. Тогда для корректного описания туннельных характеристик необходимо анализировать не только средние значения электронных чисел заполнения, но и учитывать парные корреляции локализованных электронов. Кроме того, исследуем самый общий случай, когда величина кулоновского взаимодействия сопоставима с величинами характерных энергетических параметров в системе $U_{ij} \sim \varepsilon_{i(j)}$. В этом случае требуется точный учет корреляционных функций локализованных электронов во всех порядках.

§ 4.2. Туннельные характеристики двухуровневой системы в приближении, учитывающем средние значения электронных чисел заполнения и парные корреляционные функции локализованных электронов

Рассмотрим случай, когда энергии кулоновского взаимодействия достаточно велики и в рассматриваемой системе выполнено условие $U_{ij} \gg \varepsilon_{i(j)}$ [157]. Такое соотношение между параметрами системы может быть достигнуто в полупроводниковых квантовых точках с характерными размерами в несколько нанометров. Выполнение этого условия означает, что для правильного описания результатов исследований туннельных характери-

стик системы необходимо вычислить не только средние значения электронных чисел заполнения, но и парные корреляторы локализованных электронов. Таким образом, в выражениях для чисел заполнения и туннельного тока будем оставлять слагаемые, содержащие члены вида $f_{k(p)}(\varepsilon_i + U_{ij})$, а все корреляторы высших порядков и парные корреляторы, содержащие слагаемые $f_{k(p)}(\varepsilon_i + U_{ij} + U_{kl})$, учитывать не будем. Такая модель описывает состояния системы с двумя электронами. Вычислить парные корреляторы можно применяя следующее правило:

$$\left\langle \frac{\partial n_{i\sigma} n_{j\sigma'}}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial n_{i\sigma}}{\partial t} n_{j\sigma'} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial n_{j\sigma'}}{\partial t} n_{i\sigma} \right\rangle \quad (4.15)$$

Полное выражение, которое определяет систему уравнений для парных корреляторов чисел заполнения в стационарном случае, имеет вид:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial n_{i\sigma} n_{j\sigma'}}{\partial t} \right\rangle &= (\Gamma_{ki} + \Gamma_{pi} + \Gamma_{kj} + \Gamma_{pj}) \cdot \langle n_{i\sigma} n_{j\sigma'} \rangle - \\ &- (\Gamma_{ki} f_k(\varepsilon_i + U_{ij}) + \Gamma_{pi} f_p(\varepsilon_i + U_{ij})) \cdot \langle n_{j\sigma'} (1 - n_{j-\sigma'}) (1 - n_{i-\sigma}) \rangle - \\ &- (\Gamma_{kj} f_k(\varepsilon_j + U_{ij}) + \Gamma_{pj} f_p(\varepsilon_j + U_{ij})) \cdot \langle n_{i\sigma} (1 - n_{i-\sigma}) (1 - n_{j-\sigma'}) \rangle - \\ &- (\Gamma_{ki} f_k(\varepsilon_i + U_{ii} + U_{ij}) + \Gamma_{pi} f_p(\varepsilon_i + U_{ii} + U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{i-\sigma} n_{j\sigma'} (1 - n_{j-\sigma'}) \rangle - (\Gamma_{ki} f_k(\varepsilon_i + 2U_{ij}) + \Gamma_{pi} f_p(\varepsilon_i + 2U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{j-\sigma'} n_{j\sigma'} (1 - n_{i-\sigma}) \rangle - \\ &- (\Gamma_{ki} f_k(\varepsilon_i + U_{ii} + 2U_{ij}) + \Gamma_{pi} f_p(\varepsilon_i + U_{ii} + 2U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{i-\sigma} n_{j\sigma'} n_{j-\sigma'} \rangle - (\Gamma_{kj} f_k(\varepsilon_j + U_{jj} + U_{ij}) + \Gamma_{pj} f_p(\varepsilon_j + U_{jj} + U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{j-\sigma'} n_{i\sigma} (1 - n_{i-\sigma}) \rangle - (\Gamma_{kj} f_k(\varepsilon_j + 2U_{ij}) + \Gamma_{pj} f_p(\varepsilon_j + 2U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{i-\sigma} n_{j\sigma'} (1 - n_{j-\sigma'}) \rangle - \\ &- (\Gamma_{kj} f_k(\varepsilon_j + U_{jj} + 2U_{ij}) + \Gamma_{pj} f_p(\varepsilon_j + U_{jj} + 2U_{ij})) \cdot \\ &\cdot \langle n_{j-\sigma'} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \rangle \} = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

Полагая $n_{i\sigma} = n_{i-\sigma}$ (рассмотрим парамагнитный случай), будем считать, что $\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle = \langle n_{i\sigma} n_{j-\sigma} \rangle$.

Система уравнений для определения корреляторов $K_{11} \equiv \langle n_{1\sigma} n_{1-\sigma} \rangle$, $K_{22} \equiv \langle n_{2\sigma} n_{2-\sigma} \rangle$ и $K_{12} \equiv \langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle$ в матричной форме будет иметь вид:

$$A \cdot K = I \quad (4.17)$$

где A , K и I - матрицы следующего вида:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2n^T(\varepsilon_1 + U_{11}) & 0 \\ 0 & 2n^T(\varepsilon_2 + U_{22}) & 1 \\ \frac{n^T}{2}(\varepsilon_2 + U_{12}) & 1 + \frac{n^T}{2}(\varepsilon_1 + U_{12}) + \frac{n^T}{2}(\varepsilon_2 + U_{12}) & \frac{n^T}{2}(\varepsilon_1 + U_{12}) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

$$K = \begin{pmatrix} K_{11} \\ K_{22} \\ K_{12} \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

$$I = \begin{pmatrix} n^T(\varepsilon_1 + U_{11}) \cdot n_{1\sigma} \\ n^T(\varepsilon_1 + U_{11}) \cdot n_{2\sigma} \\ \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_1 + U_{12}) \cdot n_{2\sigma} + \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_2 + U_{12}) \cdot n_{1\sigma} \end{pmatrix} \quad (4.20)$$

Запишем явные выражения для корреляторов K_{12} , K_{11} и K_{22} :

$$K_{12} = \frac{\frac{1}{2}n^T(\varepsilon_1 + U_{12}) \cdot (1 - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) \cdot n_{2\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} + \frac{\frac{1}{2}n^T(\varepsilon_2 + U_{12}) \cdot (1 - n^T(\varepsilon_1 + U_{11})) \cdot n_{1\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} \quad (4.21)$$

$$K_{11} = \frac{(1 + \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_1 + U_{12}) - \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_2 + U_{12}) - n^T(\varepsilon_1 + U_{12})n^T(\varepsilon_2 + U_{22}))}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} \cdot \frac{n^T(\varepsilon_1 + U_{11})n_{1\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} - \frac{n^T(\varepsilon_1 + U_{11})n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(1 - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) \cdot n_{2\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} \quad (4.22)$$

$$K_{22} = \frac{(1 + \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_2 + U_{12}) - \frac{1}{2}n^T(\varepsilon_1 + U_{12}) - n^T(\varepsilon_2 + U_{12})n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} \cdot$$

$$\frac{n^T(\varepsilon_2 + U_{22})n_{2\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} - \frac{n^T(\varepsilon_2 + U_{22})n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(1 - n^T(\varepsilon_1 + U_{11})) \cdot n_{1\sigma}}{1 + n^T(\varepsilon_1 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_2 + U_{22})) + n^T(\varepsilon_2 + U_{12})(\frac{1}{2} - n^T(\varepsilon_1 + U_{11}))} \quad (4.23)$$

Уравнения для расчета чисел заполнения имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} &= \Gamma_k \cdot (n_{1\sigma} - (1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_1) - \\ &- n_{1-\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{2\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11}) - \\ &- 2 \cdot n_{2\sigma}(1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{1-\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{12}) + (k \leftrightarrow p)) = 0 \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_2}{\partial t} &= \Gamma_k \cdot (n_{2\sigma} - (1 - n_{2-\sigma})(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{1\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_1) - \\ &- n_{2-\sigma}(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{1\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_2 + U_{22}) - \\ &- 2 \cdot n_{1\sigma}(1 - n_{1-\sigma})(1 - n_{2-\sigma}) \cdot f_k(\varepsilon_2 + U_{21}) + (k \leftrightarrow p)) = 0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

Полагая $n_{i\sigma} = n_{i-\sigma}$ и пренебрегая корреляторами третьего порядка получим:

$$\begin{aligned} n_{1\sigma} \cdot (1 + \tilde{n}_{11}^T) + n_{2\sigma} \cdot 2\tilde{n}_{12}^T - K_{22} \cdot (n^T(\varepsilon_1) - 2n^T(\varepsilon_1 + U_{12})) + \\ + 2 \cdot K_{12} \cdot (-n^T(\varepsilon_1) + n^T(\varepsilon_1 + U_{11}) + n_T(\varepsilon_1 + U_{12})) = n^T(\varepsilon_1) \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} n_{2\sigma} \cdot (1 + \tilde{n}_{22}^T) + n_{1\sigma} \cdot 2\tilde{n}_{21}^T - K_{11} \cdot (n^T(\varepsilon_2) - 2n^T(\varepsilon_2 + U_{12})) + \\ + 2 \cdot K_{12} \cdot (-n^T(\varepsilon_2) + n^T(\varepsilon_2 + U_{22}) + n_T(\varepsilon_2 + U_{12})) = n^T(\varepsilon_2) \end{aligned} \quad (4.27)$$

Для конечной величины кулоновского взаимодействия, в случае, когда наиминимум по энергии после уровней ε_1 и ε_2 оказывается уровень энергии $\varepsilon_1 + U_{11}$ или $\varepsilon_2 + U_{22}$, величина D может обращаться в ноль или принимать отрицательные значения для определенных областей энергии. В результате числа заполнения двухуровневой системы принимают отрицательные значения. Это обусловлено тем, что в использованном приближении не

учитывается взаимодействие между двумя локализованными электронными состояниями через состояния непрерывного спектра. Для того, чтобы избежать обращения в ноль величины D , надо рассмотреть следующий порядок теории возмущений по параметру $\frac{\Gamma_i^2}{\Delta\varepsilon}$. В этом случае уравнения для чисел заполнения имеют вид:

$$\begin{aligned} n_{1\sigma} \cdot (A_{11} + \alpha_1 n_{2\sigma}^2) + n_{2\sigma} \cdot (A_{12} + \alpha_2 n_{1\sigma}^2) &= n^T(\varepsilon_1) \\ n_{2\sigma} \cdot (A_{22} + \beta_2 n_{1\sigma}^2) + n_{1\sigma} \cdot (A_{21} + \beta_1 n_{2\sigma}^2) &= n^T(\varepsilon_2) \end{aligned} \quad (4.28)$$

Величины A_{ij} зависят от туннельных чисел заполнения и параметров туннельного контакта.

Для коэффициентов α_i и β_i выполнены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \beta_1 \sim \frac{\Gamma_k^2 + \Gamma_p^2 + 2\Gamma_k\Gamma_p}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} \\ \alpha_1 &= -\alpha_2 \\ \beta_1 &= -\beta_2 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= D + A \cdot n_{1\sigma}^2 + B \cdot n_{2\sigma}^2 \\ A &= A_{11} \cdot \beta_2 - A_{12} \cdot \alpha_2 \\ B &= A_{22} \cdot \alpha_1 - A_{21} \cdot \beta_1 \\ D &= (1 + \tilde{n}_{22}^T)(1 + \tilde{n}_{11}^T) - 4\tilde{n}_{12}^T \tilde{n}_{21}^T \end{aligned} \quad (4.30)$$

Тогда, получим:

$$\begin{aligned} n_{1\sigma} &= \frac{C_1^3 + n_{1\sigma}^2 \xi_1 C_1^2}{DC_1^2 + AC_1^2 n_{1\sigma}^2 + BC_2^2 n_{1\sigma}^2} \\ n_{2\sigma} &= \frac{C_2^3 + n_{2\sigma}^2 \xi_2 C_2^2}{DC_2^2 + AC_1^2 n_{1\sigma}^2 + BC_2^2 n_{1\sigma}^2} \end{aligned} \quad (4.31)$$

Параметры A , B , C_i и ξ_i имеют простой, но достаточно громоздкий вид, и зависят только от туннельных чисел заполнения и параметров туннельного контакта.

$$\begin{aligned}
C_1 &= n^T(\varepsilon_1) \cdot A_{22} - n^T(\varepsilon_2) \cdot A_{21} \\
C_2 &= n^T(\varepsilon_2) \cdot A_{11} - n^T(\varepsilon_1) \cdot A_{12} \\
\xi_1 &= \beta_2 \cdot n^T(\varepsilon_1) - \alpha_2 \cdot n^T(\varepsilon_2) \\
\xi_2 &= \beta_1 \cdot n^T(\varepsilon_2) - \alpha_1 \cdot n^T(\varepsilon_1)
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Уравнение, определяющее числа заполнения $n_{i\sigma}$

$$(AC_1^2 + BC_2^2) \cdot n_{i\sigma}^3 + DC_i^2 \cdot n_{i\sigma} = C_i^3 + C_i^2 \xi_i \cdot n_{i\sigma}^2 \tag{4.33}$$

решается численно (два решения будут устойчивыми, одно неустойчивое). Решение уравнений для чисел заполнения имеет следующие асимптотики:

1. $Dn_{i\sigma} \gg C_i$. В этой области параметров решение имеет вид:

$$n_{i\sigma} \sim C_i \sqrt{\frac{|D|}{AC_1^2 + BC_2^2}} \tag{4.34}$$

2. $Dn_{i\sigma} \ll C_i$. В этой области параметров решение имеет вид:

$$n_{i\sigma} \sim \frac{C_i}{\sqrt[3]{AC_1^2 + BC_2^2}} \tag{4.35}$$

Конечное выражение для туннельного тока, полученное в используемом приближении и записанное с помощью парных корреляторов, имеет вид:

$$\begin{aligned}
I_{k1\sigma} &= \Gamma_k \cdot \{ \langle n_{1\sigma} \rangle - (1 - \langle n_{1\sigma} \rangle - 2\langle n_{2\sigma} \rangle + K_{22} + 2K_{12}) \cdot \\
&\quad \cdot f_k(\varepsilon_1) - (\langle n_{1\sigma} \rangle - 2K_{12}) \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{11}) - \\
&\quad - 2 \cdot (\langle n_{2\sigma} \rangle - K_{12} - K_{22}) \cdot f_k(\varepsilon_1 + U_{12})
\end{aligned} \tag{4.36}$$

Выражения для чисел заполнения принимают достаточно простой и компактный вид для нескольких предельных случаев. В случае бесконечно больших значений величин кулоновского взаимодействия в системе ($U_{ij} \rightarrow \infty$) выражения для чисел заполнения имеют вид:

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{n_1^T(1 - n_2^T)}{(1 + n_1^T)(1 + n_2^T) - 4n_1^T n_2^T} \\ n_2 &= \frac{n_2^T(1 - n_1^T)}{(1 + n_1^T)(1 + n_2^T) - 4n_1^T n_2^T} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Зная выражения для электронных чисел заполнения (4.37), можно записать туннельный ток следующим образом:

1. В случае, когда оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми, туннельный ток определяется суммой чисел заполнения на каждом из уровней энергии: $I_k = 2\Gamma_k \cdot (n_1 + n_2)$.

2. Если один из уровней энергии расположен выше уровня Ферми, а другой-ниже, то выражение для туннельного тока принимает вид: $I_k = 2\Gamma_k \cdot (3n_1 + 2n_2 - 1)$.

3. Когда оба уровня энергии расположены ниже уровня Ферми, туннельный ток можно записать следующим образом: $I_k = 2\Gamma_k \cdot (n_1 + n_2 - 0,5)$.

Второй предельный случай описывает ситуацию, когда уровни энергии близки к друг другу (например два вырожденных по орбитальному моменту состояния) $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$ и, следовательно, $U_{ij} = U$. В этом случае числа заполнения имеют вид:

$$n_\sigma = \frac{n^T(\varepsilon)}{1 + 3 \cdot n^T(\varepsilon)} \quad (4.38)$$

Результаты расчетов неравновесных чисел заполнения и туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте для различных значений параметров системы (положений уровней энергии, величин кулоновского взаимодействия, скоростей релаксации) представлены на рис.4.2-4.4.

При анализе туннельных характеристик системы рассмотрены различные возможные экспериментальные реализации: оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми (рис.4.2), оба уровня энергии расположены ниже уровня Ферми (рис.4.3), один уровень энергии расположен выше уровня Ферми, а другой - ниже (рис.4.4). При расчетах учтено, что напряжение приложено к зонду СТМ (правому берегу туннельного контакта), что приводит к смещению уровня Ферми острия зонда относительно уровня Ферми образца.

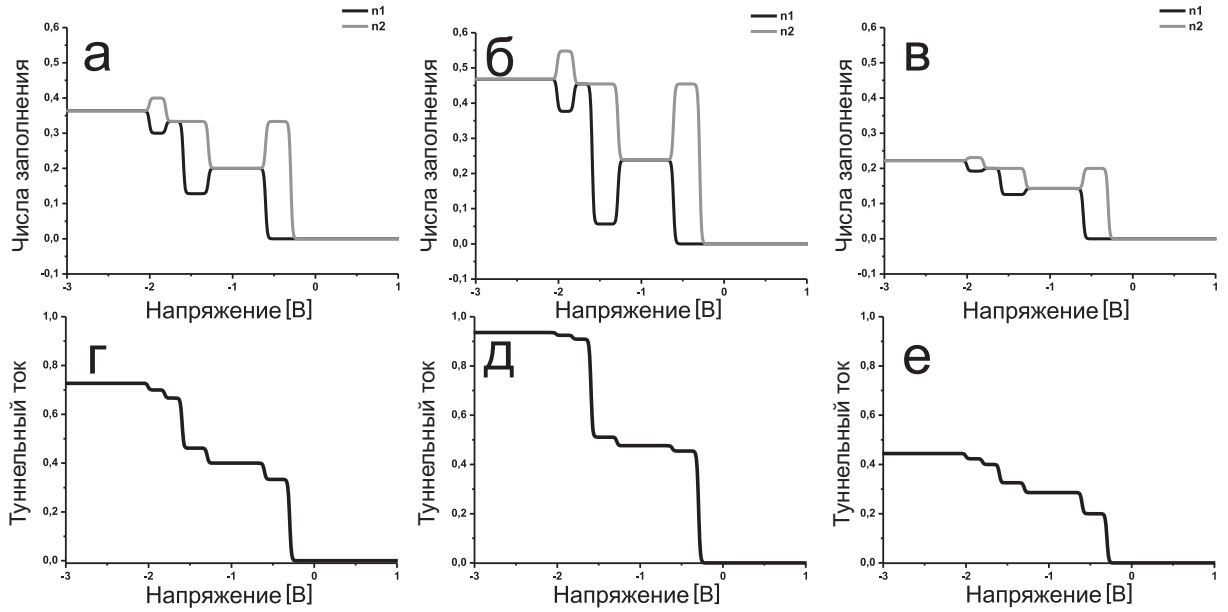


Рис. 4.2. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0,60$, $\varepsilon_2 = 0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,40$, $U_{22} = 1,50$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б)., д). $\Gamma_k = 0,05$, $\Gamma_p = 0,01$; в)., е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,03$.

Представленные на рис. 4.2, 4.3 и 4.4 зависимости демонстрируют следующие особенности: сильное перераспределение заряда в системе при изменении напряжения, ступенчатая структура вольт-амперных характеристик, возникновение инверсной заселенности уровней энергии. Тщательное исследование этих эффектов позволит выявить природу особенностей, возникающих при электронном транспорте в многоуровневых системах нанометровых размеров. Кроме того, явление перераспределение заряда в системе при изменении напряжения и возникновение инверсной заселенности уровней энергии может быть применено при создании зарядовых переключателей и устройств памяти, основанных на переключении между несколькими стабильными состояниями.

Рисунки 4.2-4.4 отчетливо демонстрируют, что учет парных кулоновских корреляций для локализованных электронов приводит к значительному перераспределению заряда в системе между двумя электронными уровнями при определенных значениях напряжения на контакте (рис.4.2а-в-4.4а-в). В случае, когда оба уровня энергии расположены выше (рис.4.2) или ниже (рис.4.3) уровня Ферми, заряд в системе либо преимущественно локализован на нижнем электронном уровне $n_1 < n_2$ ($\varepsilon_2 < eV < \varepsilon_1$, $\varepsilon_2 + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{12}$ и $\varepsilon_2 + U_{22} < eV < \varepsilon_1 + U_{11}$), либо распределен

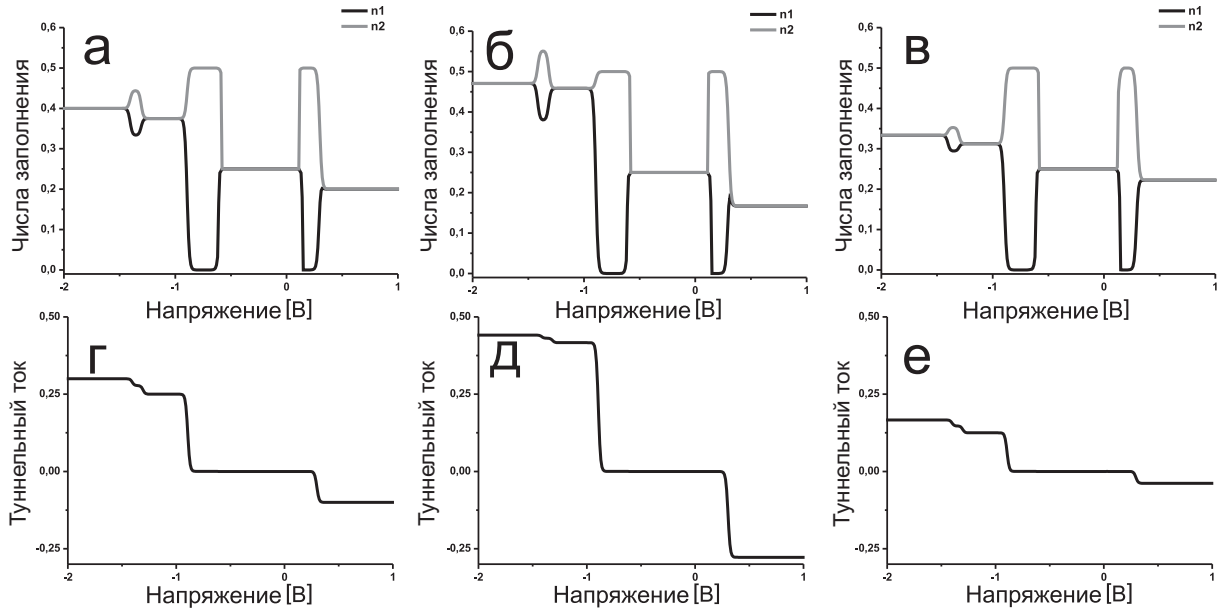


Рис. 4.3. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = -0,10$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,50$, $U_{22} = 1,60$ одинаковы для всех графиков. а).,г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б).,д). $\Gamma_k = 0,05$, $\Gamma_p = 0,01$; в).,е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,03$.

поровну между электронными уровнями $n_1 = n_2$ ($\varepsilon_1 < eV < \varepsilon_2 + U_{12}$, $\varepsilon_1 + U_{12} < eV < \varepsilon_2 + U_{22}$ и $\varepsilon_1 + U_{11} < eV$). Важно отметить, что перераспределение заряда происходит обратимым образом. Этот эффект может быть использован для создания зарядовых переключателей на основе многоуровневых примесных атомов или квантовых точек.

Наиболее интересным эффектом являются резкие скачки чисел заполнения на каждом из уровней энергии при определенных значениях напряжения на туннельном контакте, вызванные кулоновскими корреляциями. Таким образом, если электронные состояния обладают различной симметрией, можно подбором геометрии системы манипулировать зарядом в системе, аккумулируя его в различных пространственных областях. Следовательно, с помощью системы с несколькими уровнями энергии и кулоновским взаимодействием можно формировать различные зарядовые конфигурации для дальнейшего исследования особенностей процессов релаксации заряда. С технологической точки зрения возможность аккумулировать заряд в различных пространственных областях дает принципиальную возможность для применения системы нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии при создании элементов памяти.

В случае, когда оба уровня энергии расположены ниже уровня Фер-

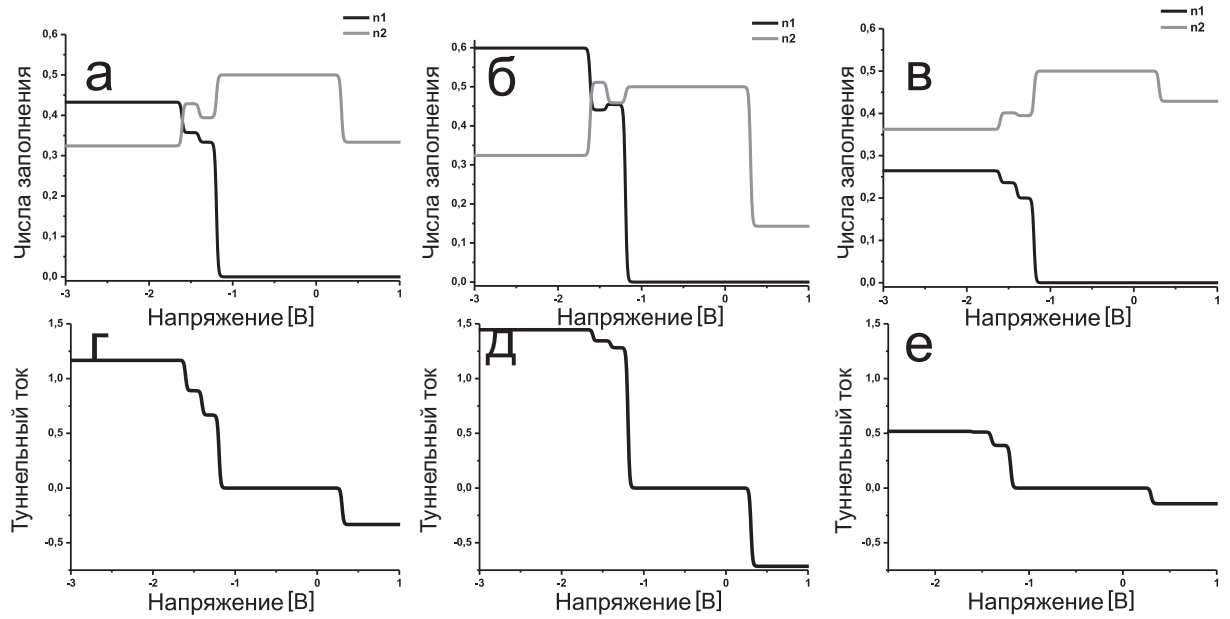


Рис. 4.4. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой- ниже. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0,20$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,40$, $U_{22} = 1,70$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б)., д). $\Gamma_k = 0,05$, $\Gamma_p = 0,01$; в)., е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,03$.

ми, существуют области напряжения на туннельном контакте, когда верхний уровень энергии полностью опустошается $n_1 = 0$ ($\varepsilon_2 < eV < \varepsilon_1$ и $\varepsilon_2 + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{12}$) (рис.4.3). Описанные закономерности выполняются для всех соотношений между скоростями туннельных переходов Γ_k и Γ_p . Однако они выражены наиболее ярко в случае, когда скорость прихода электронов в локализованное состояние превосходит скорость ухода из локализованного состояния $\Gamma_k > \Gamma_p$. Обнаруженный эффект полного опустошения уровней энергии с последующим их заполнением может быть использован для создания обратимых зарядовых переключателей.

Наиболее интересным эффектом является формирование инверсной заселенности в двухуровневой системе, вызванное кулоновскими корреляциями локализованных электронов, для определенных значений напряжения на туннельном контакте (рис.4.4). В отсутствии кулоновского взаимодействия разность в заполнении электронных уровней определяется величинами скоростей туннельных переходов $n_1 - n_2 \sim \gamma_{k1}\gamma_{p2} - \gamma_{p1}\gamma_{k2}$. Поэтому в отсутствии кулоновского взаимодействия в случае $\gamma_{k(p)1} = \gamma_{k(p)2}$ (рис.4.4а) разность в заполнении электронных уровней в точности равна нулю.

Эффект формирования инверсной заселенности обнаружен для случая, когда один из уровней энергии расположен выше уровня Ферми, а

другой - ниже (рис.4.4). Когда величина напряжения на туннельном контакте не превосходит значения $\varepsilon_1 + U_{12}$, весь заряд локализован на нижнем уровне энергии ($n_1 = 0$). С ростом величины напряжения происходит перераспределение заряда между уровнями энергии в системе и образуются области с инверсной заселенностью. Локальный заряд в основном аккумулируется на верхнем уровне, когда величина напряжения смещения на туннельном контакте превосходит значение $\varepsilon_1 + U_{12}$.

Эффект образования инверсной заселенности наиболее ярко проявляется в случае, когда наибольшей из величин связи двухуровневой системы с состояниями непрерывного спектра, является связь с состояниями непрерывного спектра образца (рис.4.4б). Инверсная заселенность также наблюдается и для случая симметричного туннельного контакта (рис.4.4а). Если амплитуда туннелирования в состоянии непрерывного спектра острия зонда превосходит амплитуду туннелирования в состоянии непрерывного спектра образца, то инверсная заселенность не наблюдается (рис.4.4в). В этом случае, с ростом величины напряжения на туннельном контакте амплитуда чисел заполнения верхнего уровня возрастает, но большая часть заряда системы продолжает быть локализованной на нижнем энергетическом уровне. Таким образом, эффект образования инверсной заселенности имеет существенно неравновесную природу. Эффект формирования неравновесной заселенности может быть применен при конструировании излучателей на основе квантовых точек.

Зависимости туннельного тока от напряжения для различных положений уровней энергии представлены на рис.4.2г-е-4.4г-е. Амплитуды туннельного тока нормированы на величину $2\Gamma_k$. Для любых значений параметров системы зависимости туннельного тока от напряжения имеют вид ступеней. Высота и ширина ступеней зависят от параметров туннельного контакта (амплитуд туннелирования и величин кулоновского взаимодействия). В случае, когда оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми в зависимости туннельного тока от напряжения наблюдается шесть ступеней (рис.4.2г-е). Если оба уровня расположены ниже уровня Ферми, то в зависимости туннельного тока от напряжения наблюдаются четыре ступени (рис.4.3г-е), а ступень, соответствующая положению верхнего одноэлектронного уровня не проявляется. При этом в системе происходит перераспределение заряда, вызванное кулоновскими корреляциями локализованных электронов. В случае, когда только один из уровней энергии

расположен ниже уровня Ферми, в зависимости туннельного тока от напряжения также наблюдаются четыре ступени (рис.4.4г-е).

Результаты расчетов с учетом парных кулоновских корреляторов демонстрируют, что связанные в наличие парных кулоновских корреляций поправки сказываются на туннельных характеристиках системы только в области напряжений, в которой значительную роль начинают играть слабые порядки $\varepsilon_i + U_{ij}$. Впервые показано, что в системе с несколькими уровнями энергии области с инверсной заселенностью могут возникать не в результате разности между величинами скоростей туннельных переходов, а в связи с наличием кулоновских корреляций локализованных электронов. Таким образом, продемонстрирована существенно неравновесная природа формирования инверсной заселенности. Обнаружено, что вызванное кулоновскими корреляциями локализованных электронов перераспределение заряда в системе не проявляется в полном объеме в зависимостях туннельного тока от напряжения. Следовательно, для полного анализа особенностей электронного транспорта в системах с несколькими уровнями энергии экспериментальные исследования необходимо дополнять теоретическими расчетами, позволяющими корректно описать системы сверхмалых размеров с кулоновскими корреляциями.

В следующем параграфе показано, что предложенный для исследования особенностей электронного транспорта подход дает возможность точно вычислить все корреляторы для локализованных электронов в системах нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии (то есть предложено реалистичное описание наносистем с сильными кулоновскими корреляциями).

§ 4.3. Туннельные характеристики двухуровневой системы в приближении, учитывающем средние значения электронных чисел заполнения и корреляционные функции локализованных электронов всех порядков

В настоящее время одной из нерешенных проблем в физике микро- и наноструктур является исследование систем, для которых величина кулоновского взаимодействия по порядку величины сравнима с расстоянием между одноэлектронными уровнями энергии. Это условие выполняется в

случае, если расстояние между примесными атомами сопоставимо по величине с постоянной решетки подложки. Тогда образуется сильно связанный примесный комплекс, для которого величина связи между примесями значительно превосходит величину связи каждого из локализованных состояний с состояниями непрерывного спектра. Другой возможной экспериментальной реализацией является квантовая точка с несколькими уровнями энергии или несколько связанных одноуровневых квантовых точек, слабо взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра подложки.

Существующие методы теоретического анализа неравновесных наноструктур с сильными электронными корреляциями (метод функциональной ренорм-группы, квантовые методы Монте-Карло, динамическое приближение среднего поля и т.д.) не позволяют описать наблюдаемые особенности электронного транспорта в случае, когда величина кулоновского взаимодействия сопоставима с расстоянием между одноэлектронными уровнями энергии локализованных состояний или с ширинами уровней, обусловленными туннельной связью с состояниями непрерывного спектра. Соответственно, возникает проблема развтия взаимосвязанных теоретических подходов и методов корректного описания особенностей нестационарного электронного транспорта в неравновесных наноструктурах с сильными электронными корреляциями без введения малого параметра по величине кулоновского взаимодействия. Такие системы можно описать моделью нескольких электронных уровней с кулоновским взаимодействием между локализованными электронами. Для корректного описания необходимо учитывать кулоновские корреляции во всех порядках теории возмущений по величине кулоновского взаимодействия [283]. В двухуровневой системе это требование приводит к необходимости вычислять не только парные, но и тройные корреляторы локализованных электронов, которые входят как параметры в уравнения (4.16) для парных корреляционных функций.

Тройные корреляторы могут быть вычислены по правилу:

$$\left\langle \frac{\partial n_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{i-\sigma'}}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial n_{j\sigma} n_{j-\sigma}}{\partial t} n_{i-\sigma'} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial n_{i-\sigma'}}{\partial t} n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \right\rangle \quad (4.39)$$

Тогда выражение для тройных корреляторов, записанное через парные, имеет вид:

$$\langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma} n_{i-\sigma'} \rangle = \{ \Gamma_{kj} \cdot f_k(\varepsilon_j + U_{jj} + 2U_{ij}) \cdot$$

$$\begin{aligned}
& \cdot (\langle n_{i-\sigma} n_{j\sigma} \rangle + \langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle) + \Gamma_{ki} \cdot f_k(\varepsilon_i + 2U_{ij}) \cdot \langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \rangle + \\
& + \Gamma_{pj} \cdot f_p(\varepsilon_j + U_{jj} + 2U_{ij}) \cdot (\langle n_{i-\sigma} n_{j\sigma} \rangle + \langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle) + \\
& + \Gamma_{pi} \cdot f_p(\varepsilon_i + 2U_{ij}) \cdot \langle n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \rangle \cdot \{ \Gamma_{ki} \cdot \{ 3 + f_k(\varepsilon_i + 2U_{ij}) - \\
& - f_k(\varepsilon_i + U_{ii} + 2U_{ij}) \} + \Gamma_{pi} \cdot \{ 3 + f_p(\varepsilon_i + 2U_{ij}) - \\
& - f_p(\varepsilon_i + U_{ii} + 2U_{ij}) \} \}^{-1}
\end{aligned} \tag{4.40}$$

Будем рассматривать парамагнитный случай: $n_{i\sigma} = n_{i-\sigma}$, $\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle = \langle n_{i\sigma} n_{j-\sigma} \rangle$ и $\langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} n_{j\sigma} \rangle = \langle n_{i\sigma} n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle$. Тогда система уравнений для парных корреляторов $K_{11} \equiv \langle n_{1\sigma} n_{1-\sigma} \rangle$, $K_{22} \equiv \langle n_{2\sigma} n_{2-\sigma} \rangle$ и $K_{12} \equiv \langle n_{1\sigma} n_{2\sigma} \rangle$ после подстановки выражения(4.40) в уравнение (4.16) будет иметь вид:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} K_{11} \\ K_{12} \\ K_{22} \end{pmatrix} = F \tag{4.41}$$

$$F = \begin{pmatrix} n_1^T(\varepsilon_1 + U_{11}) \cdot n_{1\sigma} \\ n_2^T(\varepsilon_2 + U_{22}) \cdot n_{2\sigma} \\ \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2} n_1^T(\varepsilon_1 + U_{12}) n_{2\sigma} + \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} n_2^T(\varepsilon_2 + U_{12}) n_{1\sigma} \end{pmatrix} \tag{4.42}$$

с коэффициентами a_{ij} :

$$\begin{aligned}
a_{11} &= 1 \\
a_{12} &= 2 \cdot n_1^T(\varepsilon_1 + U_{11}) - n_1^T(\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}) - \\
& - 2 \cdot \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} \cdot n_2^T(\varepsilon_2 + U_{22} + U_{12}) \cdot \Phi_1 \\
a_{13} &= -n_1^T(\varepsilon_1 + 2 \cdot U_{12}) \cdot \Phi_1
\end{aligned} \tag{4.43}$$

$$\begin{aligned}
a_{21} &= -n_2^T(\varepsilon_2 + 2 \cdot U_{12}) \cdot \Phi_2 \\
a_{22} &= 2 \cdot n_2^T(\varepsilon_2 + U_{22}) - n_2^T(\varepsilon_2 + U_{22} + U_{12}) - \\
& - 2 \cdot \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \cdot n_1^T(\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}) \cdot \Phi_2 \\
a_{23} &= 1
\end{aligned} \tag{4.44}$$

$$a_{31} = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \cdot (n_2^T(\varepsilon_2 + U_{12}) -$$

$$\begin{aligned}
& - n_2^T(\varepsilon_2 + 2 \cdot U_{12}) \cdot (1 + 2 \cdot A_2)) \\
a_{32} &= 1 + \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \cdot (n_1^T(\varepsilon_1 + U_{12}) - \\
& - n_1^T(\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}) \cdot (1 + 4 \cdot A_2)) \\
& + \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \cdot (n_2^T(\varepsilon_2 + U_{12}) - \\
& - n_2^T(\varepsilon_2 + U_2 + U_{12}) \cdot (1 + 4 \cdot A_1)) \\
a_{33} &= \frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 + \Gamma_2} \cdot (n_1^T(\varepsilon_1 + U_{12}) - \\
& - n_1^T(\varepsilon_1 + 2 \cdot U_{12}) \cdot (1 + 2 \cdot A_1)) \tag{4.45}
\end{aligned}$$

где $\Gamma_i = \Gamma_{ki} + \Gamma_{pi}$. Введем числа заполнения в отсутствии кулоновского взаимодействия $n_i^T(\varepsilon_i)$, $n_i^T(\varepsilon_i + U_{ij})$:

$$n_i^T(\varepsilon) = \frac{\Gamma_{ki} f_k(\varepsilon) + \Gamma_{pi} f_p(\varepsilon)}{\Gamma_{ki} + \Gamma_{pi}} \tag{4.46}$$

Коэффициенты Φ_i и A_i можно определить из выражений:

$$\begin{aligned}
\Phi_i &= \frac{n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii}) - n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + U_{ij})}{3 + n_i^T(\varepsilon_i + 2 \cdot U_{ij}) - n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})} + \\
& + \frac{n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})}{3 + n_i^T(\varepsilon_i + 2 \cdot U_{ij}) - n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})} \\
A_i &= \frac{\frac{1}{2} \cdot n_i^T(\varepsilon_i + U_{ij}) - \frac{1}{2} \cdot n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + U_{ij})}{3 + n_i^T(\varepsilon_i + 2 \cdot U_{ij}) - n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})} - \\
& - \frac{\frac{1}{2} \cdot n_i^T(\varepsilon_i + 2 \cdot U_{ij}) + \frac{1}{2} \cdot n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})}{3 + n_i^T(\varepsilon_i + 2 \cdot U_{ij}) - n_i^T(\varepsilon_i + U_{ii} + 2 \cdot U_{ij})} \tag{4.47}
\end{aligned}$$

Парные корреляционные функции K_{ij} можно выразить через величины $n_{i(j)\sigma}$ из уравнений (4.41)-(4.42). Подставляя полученное из уравнений (4.16) и (4.40) решение для корреляционных функций высших порядков в уравнение (4.14), можно найти электронные числа заполнения $\langle n_{i\sigma} \rangle$ и выражение для туннельного тока.

Чтобы избежать отрицательных значений детерминанта системы уравнений (4.41) или обращения его в ноль для некоторых значений параметров, необходимо учесть поправки следующего порядка по теории возмущений по параметру $\frac{\Gamma_i}{\varepsilon_i}$. Тогда уравнения для чисел заполнения $n_{i\sigma}$ будут содержать дополнительные нелинейные члены и могут быть схематично записаны в виде:

$$\begin{aligned} n_{1\sigma} \cdot (A_{11} + \mu_1 n_{2\sigma}^2) + n_{2\sigma} \cdot (A_{12} + \mu_2 n_{1\sigma}^2) &= n^T(\varepsilon_1) \\ n_{2\sigma} \cdot (A_{22} + \nu_2 n_{1\sigma}^2) + n_{1\sigma} \cdot (A_{21} + \nu_1 n_{2\sigma}^2) &= n^T(\varepsilon_2) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Коэффициенты A_{ij} , μ_i и ν_i являются функциями чисел заполнения и параметров туннельного контакта.

Поведение чисел заполнения $n_{i\sigma}$ и вольт-амперных характеристик сильно зависит от соотношений между параметрами системы: взаимного расположения одноэлектронных уровней энергии, величин кулоновского взаимодействия между локализованными электронами и скоростей релаксации. Представленные на рис. 4.5-4.10 зависимости демонстрируют такие общие особенности как перераспределение заряда в системе при изменении напряжения и ступенчатая структура вольт-амперных характеристик с неэквидистантными ступенями, соответствующими энергиям многоэлектронных состояний. Также в рассматриваемой системе возможно возникновение инверсной заселенности уровней энергии и формирование областей с отрицательной туннельной проводимостью.

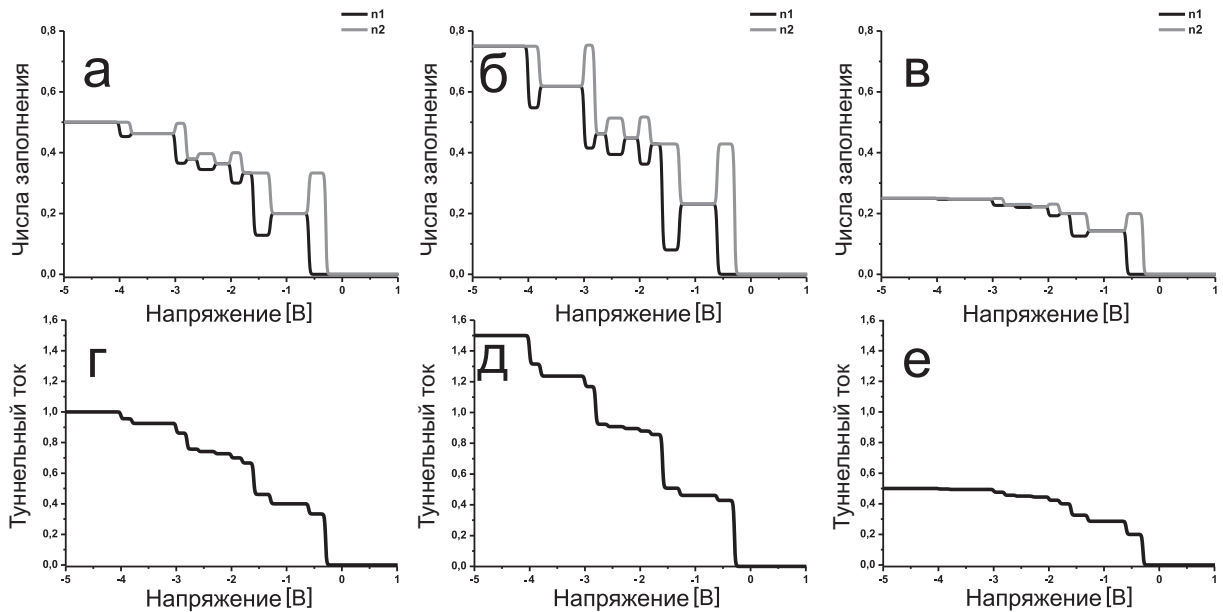


Рис. 4.5. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0,60$, $\varepsilon_2 = 0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,40$, $U_{22} = 1,50$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$; б)., д). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,03$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$; в)., е). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,03$.

Рассмотрим сначала случай, когда скорости релаксации между одноэлектронными уровнями энергии и состояниями непрерывного спектра

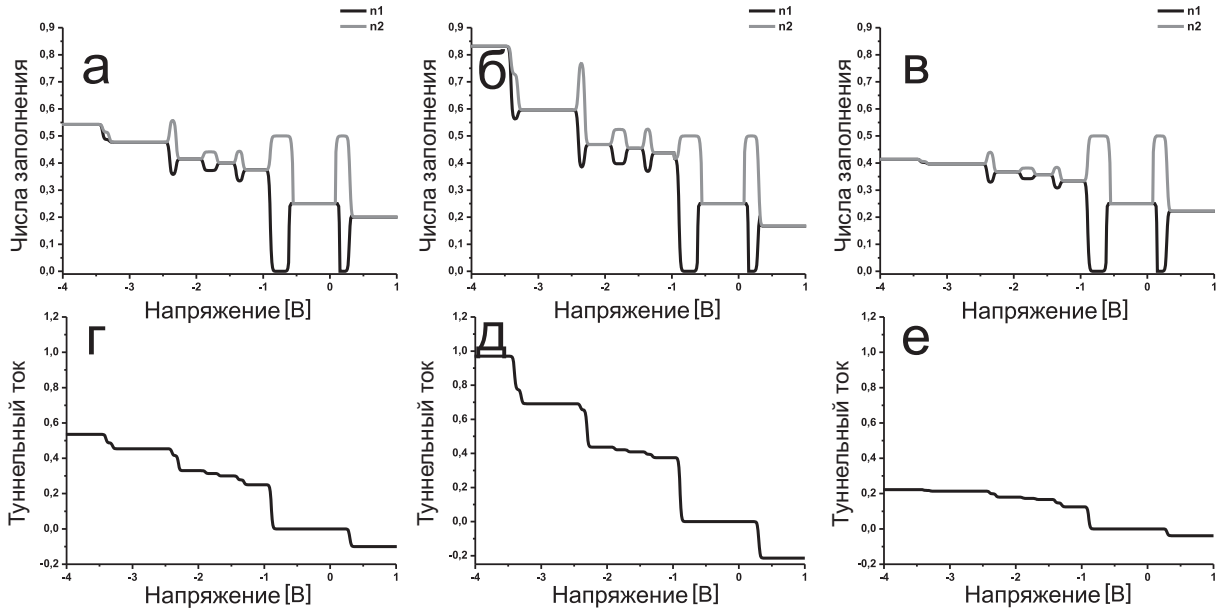


Рис. 4.6. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = -0,10$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,50$, $U_{22} = 1,60$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$; б)., д). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,03$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$; в)., е). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,03$.

имеют одинаковые значения $t_{k(p)1} = t_{k(p)2}$. На рисунках 4.5-4.10 представлены зависимости чисел заполнения и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте, полученные при помощи кинетических уравнений для различных значений энергий кулоновского взаимодействия U_{ij} и различного расположения уровней энергии относительно уровня Ферми в случае симметричного $\Gamma_{ki} \sim \Gamma_{pi}$ и асимметричного туннельного контакта $\Gamma_{ki} \ll \Gamma_{pi}$ ($\Gamma_{ki} \gg \Gamma_{pi}$) с учетом кулоновских корреляций локализованных электронов во всех порядках. При расчетах учтено, что напряжение смещения приложено к образцу. То есть, если оба уровня энергии расположены выше(ниже) уровня Ферми, то все особенности, возникающие в зависимостях чисел заполнения и туннельного тока от напряжения, наблюдаются при отрицательных(положительных) значениях eV .

В случае, когда оба уровня энергии расположены выше (рис.4.5, рис.4.8) или ниже (рис.4.6, рис.4.9) уровня Ферми образца, в рассматриваемой системе происходит многократное обратимое перераспределение заряда. С ростом напряжения на туннельном контакте для больших величин кулоновского взаимодействия U_{ij} по очереди реализуются две возможности для накопления заряда. Заряд либо распределен поровну между электронными уровнями энергии $n_1 = n_2$, либо преимущественно локализован на

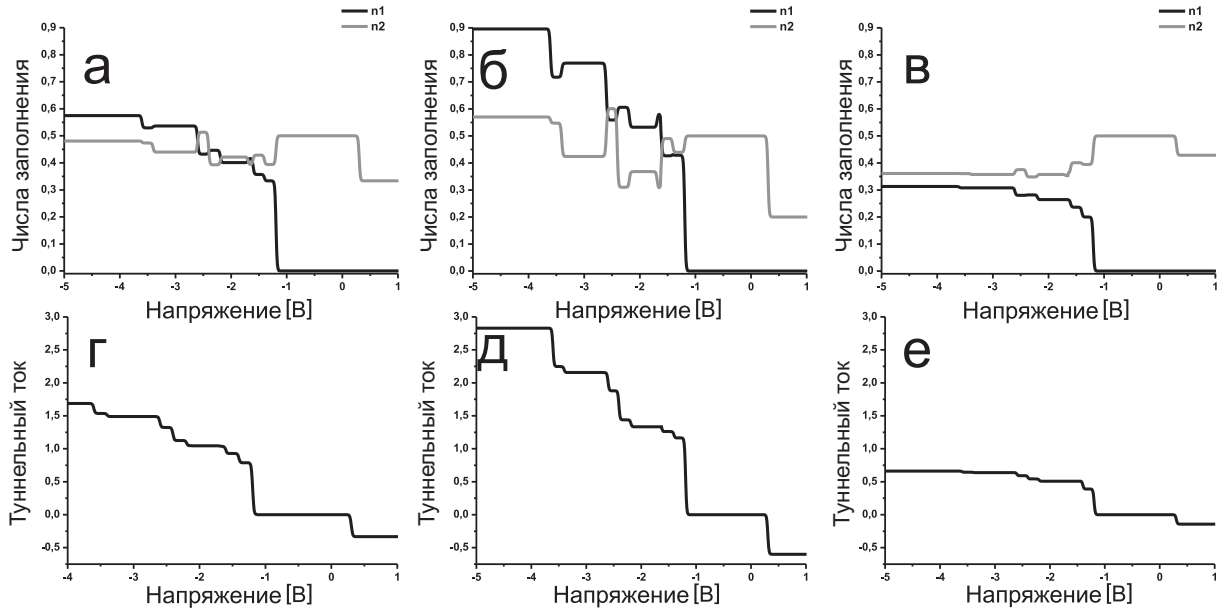


Рис. 4.7. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой - ниже. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0, 20$, $\varepsilon_2 = -0, 30$, $U_{12} = 1, 00$, $U_{11} = 1, 40$, $U_{22} = 1, 70$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0, 01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0, 01$; б)., д). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0, 03$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0, 01$; в)., е). $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0, 01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0, 03$.

нижнем уровне энергии ($n_1 < n_2$). На рисунке 4.6 показано существование двух областей напряжения на туннельном контакте, для которых при больших значениях кулоновского взаимодействия верхний уровень энергии полностью опустошается $n_1 = 0$ ($\varepsilon_2 < eV < \varepsilon_1$ и $\varepsilon_2 + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{12}$). Уменьшение величины кулоновского взаимодействия приводит к локализации заряда в основном на нижнем уровне энергии, но при этом верхний уровень опустошается не полностью $n_1 \neq 0$ (рис.4.9в). В диапазоне напряжений $\varepsilon_2 < eV < \varepsilon_1 + U_{12}$ заряд полностью локализован на нижнем уровне энергии: $n_1 = 0$.

Учет кулоновских корреляций всех порядков позволяет исследовать процессы туннелирования через двухуровневую систему в случае малых величин кулоновского взаимодействия, сравнимых со значениями уровней энергии в системе $U_{ij} \sim \varepsilon_{i(j)}$. То есть, предложенная модель позволяет исследовать реалистические модели в широком диапазоне параметров. На рисунке 4.8 продемонстрировано как меняется поведение чисел заполнения и туннельного тока с уменьшением величины кулоновского взаимодействия для симметричного туннельного контакта $\Gamma_{ki} = \Gamma_{pi}$ (расчеты, проведенные для асимметричного туннельного контакта, показывают аналогичное поведение).

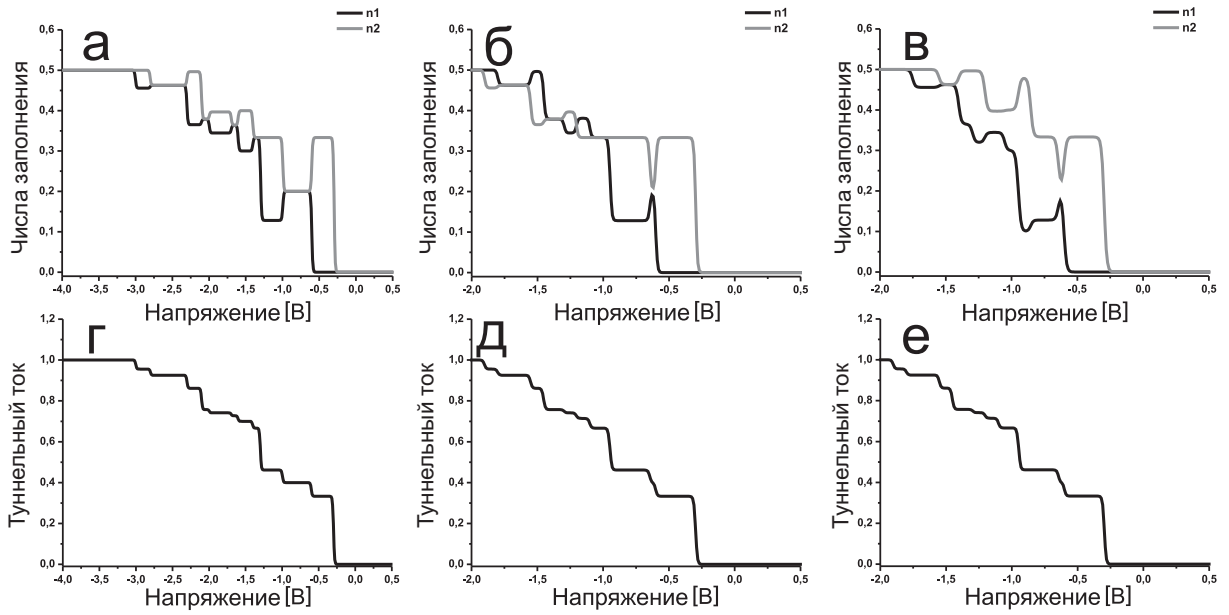


Рис. 4.8. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0,60$, $\varepsilon_2 = 0,30$, $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $U_{12} = 0,70$, $U_{11} = 1,00$, $U_{22} = 1,10$; б)., д). $U_{12} = 0,35$, $U_{11} = 0,50$, $U_{22} = 0,90$; в)., е). $U_{12} = 0,35$, $U_{11} = 0,45$, $U_{22} = 0,55$.

Рассмотрим случай, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми. Если величина кулоновского взаимодействия сопоставима с величинами энергий одноэлектронных состояний, в системе существуют три области напряжений на туннельном контакте, в которых образуется инверсная заселенность: $n_1 > n_2$ (рис.4.8б) ($\varepsilon_2 + 2U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{11}$, $\varepsilon_1 + 2U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}$ и $\varepsilon_1 + U_{11} + 2U_{12} < eV < \varepsilon_2 + U_{22} + 2U_{12}$). Возникновение инверсной заселенности связано с тем, что энергия системы в конфигурации, когда два электрона расположены на верхнем уровне, а один электрон расположен на нижнем уровне оказывается ниже, чем для конфигурации, когда два электрона расположены на нижнем уровне и один электрон расположен на верхнем уровне для параметров системы, приведенных на рисунке рис.4.8б. Дальнейшее уменьшение энергий кулоновского взаимодействия приводит к исчезновению инверсной заселенности. Заряд в основном локализуется на нижнем уровне энергии (рис.4.8в).

Процесс обратимого перераспределения заряда наиболее ярко выражен для асимметричного контакта, когда скорость релаксации в состоянии непрерывного спектра образца превосходит скорость релаксации в состоянии непрерывного спектра острия зонда.

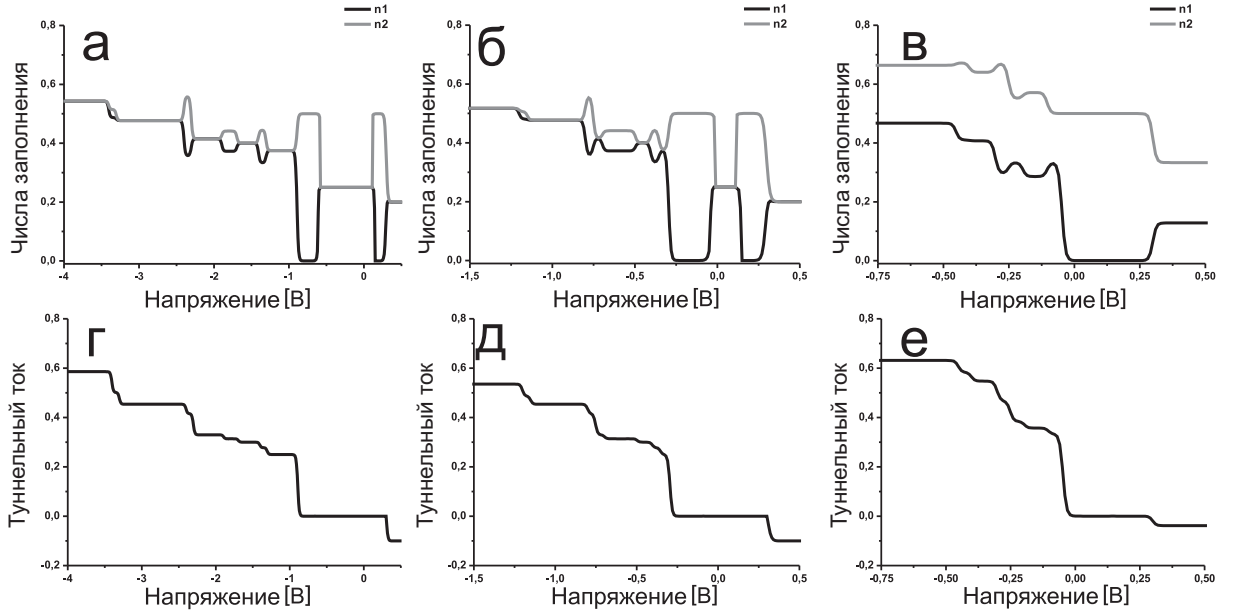


Рис. 4.9. а).-в). Зависимости чисел заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = -0,10$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0,01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0,01$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,50$, $U_{22} = 1,60$; б)., д). $U_{12} = 0,40$, $U_{11} = 0,50$, $U_{22} = 0,65$; в)., е). $U_{12} = 0,15$, $U_{11} = 0,25$, $U_{22} = 0,40$.

Необходимо заметить, что в отсутствии кулоновского взаимодействия, числа заполнения обоих электронных уровней имеют форму простой ступенчатой функции, которая соответствует туннельным числам заполнения $n^T(\varepsilon_i)$, сдвинутым друг относительно друга на величину $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$.

Возникновение инверсной заселенности, связанное с наличием в системе кулоновских корреляций, наиболее ярко проявляется в случае, когда электронные уровни энергии расположены по разные стороны относительно уровня Ферми образца (рис.4.7,4.10). При отсутствии кулоновского взаимодействия, когда выполнено соотношение между скоростями релаксации $\Gamma_{k(p)1} = \Gamma_{k(p)2}$, разность чисел заполнения двух уровней энергии ($n_1 - n_2 \sim \Gamma_{k1}\Gamma_{p2} - \Gamma_{p1}\Gamma_{k2}$) обращается в ноль. Учет кулоновских корреляций локализованных электронов в двухуровневой системе приводит к формированию инверсной заселенности в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте (рис.4.7, 4.10).

На рисунке (4.10а,б) показаны три области напряжений на туннельном контакте, для которых происходит формирование инверсной заселенности ($\varepsilon_1 + U_{11} < eV < \varepsilon_2 + 2U_{12}$, $\varepsilon_1 + 2U_{12} < eV < \varepsilon_2 + U_{22} + U_{12}$ и $\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12} < eV$). Очевидно (рис.4.6а,б), что когда значение напряжения на туннельном контакте не превосходит величину $\varepsilon_1 + U_{12}$ весь заряд

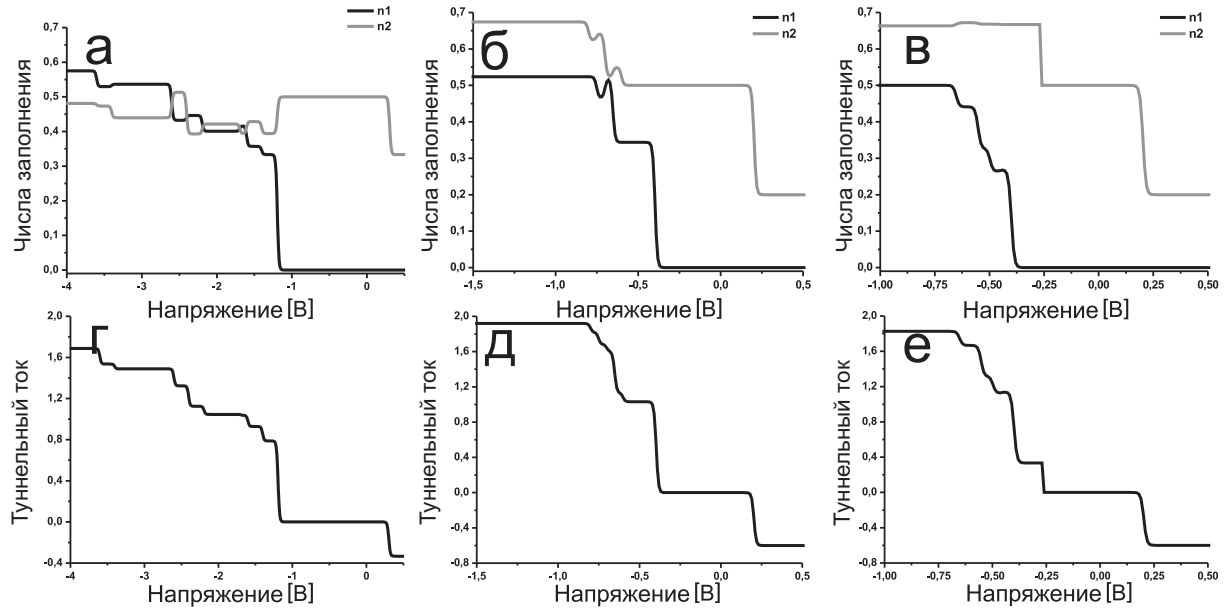


Рис. 4.10. а).-в). Зависимости числа заполнения г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой - ниже. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0, 20$, $\varepsilon_2 = -0, 30$, $\Gamma_{k1} = \Gamma_{k2} = 0, 01$, $\Gamma_{p1} = \Gamma_{p2} = 0, 01$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $U_{12} = 1, 00$, $U_{11} = 1, 40$, $U_{22} = 1, 70$; б)., д). $U_{12} = 0, 10$, $U_{11} = 0, 25$, $U_{22} = 0, 80$; в)., е). $U_{12} = 0, 10$, $U_{11} = 0, 15$, $U_{22} = 0, 25$.

в системе локализован на нижнем уровне энергии ($n_1 = 0$). С ростом напряжения на туннельном контакте происходит перераспределение заряда и образуется инверсная заселенность.

Возникновение инверсной заселенности сильно зависит от соотношения между скоростями релаксации. Инверсная заселенность наиболее ярко проявляется в асимметричном туннельном контакте, когда наибольшей является скорость релаксации в состоянии непрерывного спектра образца (k). В случае, когда двухуровневая система сильно связана с состояниями непрерывного спектра острия зонда, формирование областей с инверсной заселенностью не наблюдалось (p) (рис.4.7в). В этом случае с ростом величины напряжения на туннельном контакте, возрастает заполнение верхнего электронного уровня, но при этом основная часть заряда остается локализованной на нижнем электронном уровне.

Уменьшение величин кулоновского взаимодействия приводит к исчезновению инверсной заселенности (рис.4.10б,в), и заряд оказывается преимущественно локализован на нижнем уровне энергии. Этот эффект позволяет однозначно продемонстрировать роль кулоновских корреляций в описанных эффектах перераспределения заряда. Таким образом, для создания инверсной заселенности в системе нанометровых размеров с несколькими

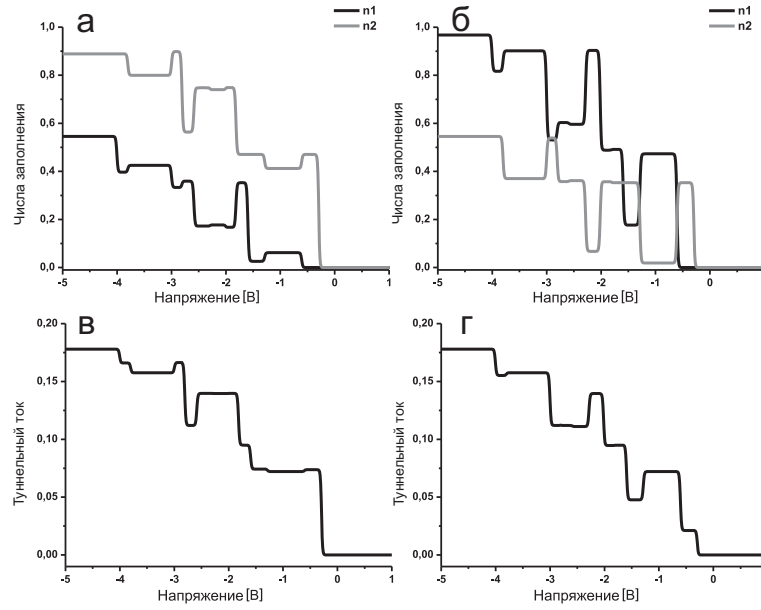


Рис. 4.11. а).-б). Зависимости чисел заполнения в).-г). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon_1 = 0,60$, $\varepsilon_2 = 0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,50$, $U_{22} = 1,60$ одинаковы для всех графиков. а)., в). $\Gamma_{k1} = 0,06$, $\Gamma_{p1} = 0,05$, $\Gamma_{k2} = 0,15$, $\Gamma_{p2} = 0,005$; б)., г). $\Gamma_{k1} = 0,15$, $\Gamma_{p1} = 0,005$, $\Gamma_{k2} = 0,06$, $\Gamma_{p2} = 0,05$.

уровнями энергии необходимо преодолеть некоторое пороговое значение величины кулоновского взаимодействия.

Зависимости туннельного тока от напряжения для различных положений уровней энергии показаны на рисунках (рис.4.5-4.10г-е) (амплитуды туннельного тока нормированы на величину $2\Gamma_k$). Для всех значений параметров системы зависимости туннельного тока от напряжения имеют ступенчатый вид. Высота и ширина ступеней зависит от параметров туннельного контакта (скоростей релаксации, величин кулоновских энергий). В случае, когда оба уровня энергии расположены ниже уровня Ферми (рис.4.6,4.9г-е), верхний уровень не проявляется как ступенька в вольт-амперных характеристиках, несмотря на то, что в системе происходит вызванное кулоновскими корреляциями перераспределение заряда.

В случае, когда скорости релаксации имеют приблизительно одинаковые значения для обоих уровней энергии, вольт-амперные характеристики имеют вид монотонных функций. Если скорости релаксации значительно различаются, то появляются дополнительные особенности. На рисунках 4.11 и 4.12 показаны результаты расчетов для случая, когда $t_{k(p)1} \neq t_{k(p)2}$. В этом случае происходит конкуренция между "одноэлектронными" неравновесными эффектами заполнения и кулоновскими корреляциями, которая

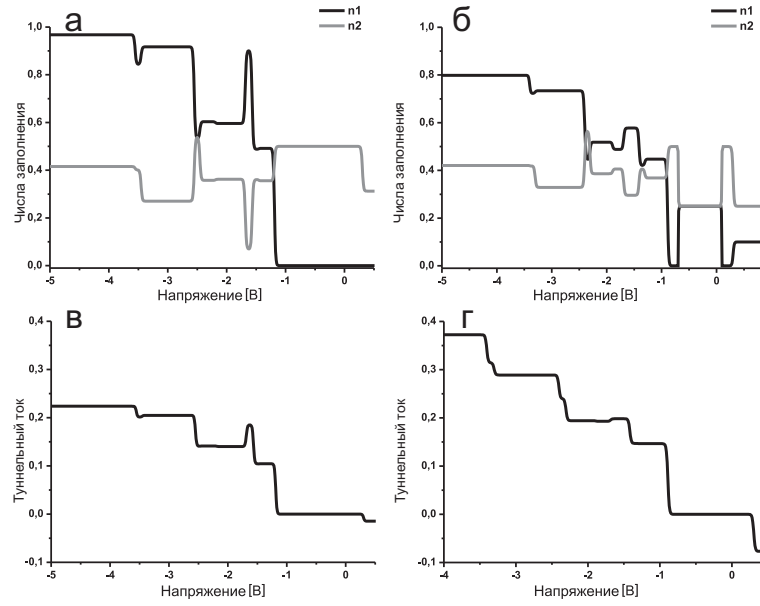


Рис. 4.12. а).-б). Зависимости чисел заполнения в).-г). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для двухуровневой системы для случая, а)., в)., когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой- ниже; б)., г)., когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Значения параметров $\Gamma_{k1} = 0,15$, $\Gamma_{p1} = 0,005$, $\Gamma_{k2} = 0,06$, $\Gamma_{p2} = 0,05$ одинаковы для всех графиков. а)., в). $\varepsilon_1 = 0,20$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,40$, $U_{22} = 1,70$; б)., г). $\varepsilon_1 = -0,10$, $\varepsilon_2 = -0,30$, $U_{12} = 1,00$, $U_{11} = 1,50$, $U_{22} = 1,60$.

приводит к тому, что перераспределение заряда в системе сопровождается появлением отрицательной туннельной проводимости. Следовательно, конкуренция неравновесных эффектов и кулоновских корреляций локализованных электронов может быть исследована не только теоретически, но и экспериментально с применением метода СТМ/СТС [192].

Результаты для случая, когда оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца, представлены на рисунке 4.11. Если скорость релаксации из состояний непрерывного спектра образца на нижний уровень энергии является наибольшей в системе, а скорость релаксации с нижнего уровня энергии в состояния непрерывного спектра острия зонда - наименьшая, (рис.4.11а,в), то заряд в системе в основном локализован на нижнем уровне энергии. Если же скорость релаксации из состояний непрерывного спектра образца на верхний уровень энергии является наибольшей в системе, а с верхнего уровня энергии в состояния непрерывного спектра острия - наименьшей (рис.4.11б,г), то заряд в основном локализован на верхнем уровне энергии, и происходит формирование инверсной заселенности. Но в связи с наличием в системе кулоновских корреляций существует три области напряжений, для которых заряд локализован в основном

на нижнем уровне энергии: $\varepsilon_2 < eV < \varepsilon_1$, $\varepsilon_2 + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{12}$ и $\varepsilon_2 + U_{22} + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}$.

Инверсная заселенность также наблюдается в случае, когда один из уровней энергии расположен выше уровня Ферми, а другой - ниже (рис.4.12а) или когда оба уровня энергии локализованы ниже уровня Ферми (рис.4.12б). В обоих случаях кулоновские корреляции влияют на заполнение одноэлектронных уровней, изменяя нормальное распределение заряда в системе на инверсное и наоборот.

На рисунке 4.12а продемонстрировано наличие нескольких областей напряжения на туннельном контакте для которых наблюдается различное распределение заряда в системе между уровнями энергии. Если величина напряжения на туннельном контакте удовлетворяет условию $eV < \varepsilon_1 + U_{12}$, то весь заряд локализован на нижнем уровне энергии ($n_1 = 0$); инверсная заселенность наблюдается (заряд в основном локализован на верхнем уровне энергии) в случае, если величина напряжения на туннельном контакте находит в следующих областях $\varepsilon_1 + U_{12} < eV < \varepsilon_2 + U_{22} + U_{12}$ и $\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12} < eV$; заряд одинаково распределен между уровнями энергии $n_1 = n_2$, если выполнено условие $\varepsilon_2 + U_{22} + U_{12} < eV < \varepsilon_1 + U_{11} + U_{12}$.

В случае, когда оба уровня энергии расположены ниже уровня Ферми (рис.4.12б) распределение заряда аналогично случаю, когда ниже уровня Ферми находится только один из уровней энергии (уровни заполнены одинаково в области напряжений $\varepsilon_1 < eV < \varepsilon_2 + U_{12}$, инверсная заселенность наблюдается для двух областей напряжений смещения на туннельном контакте $\varepsilon_1 + U_{12} < eV < \varepsilon_2 + U_{22} + U_{12}$ и $\varepsilon_1 + U_{11} + U_{12} < eV$).

Формирование областей с отрицательной туннельной проводимостью является наиболее интересным и важным эффектом среди исследуемых туннельных характеристик, изображенных на рисунках 4.11в,г и 4.12в,г. Необходимо еще раз заметить, что формирование отрицательной туннельной проводимости является результатом наличия двух факторов: наличия кулоновских корреляций и неравновесных эффектов, вызванных протеканием туннельного тока. Формирование отрицательной туннельной проводимости в системе связанных квантовых точек было обнаружено экспериментально в работе [192]. Таким образом, исследуя экспериментально и теоретически туннельные характеристики систем нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии, можно проанализировать какой из эффектов наиболее сильно влияет на особенности электронного транспорта.

Полученные результаты показывают возможность для управления параметрами электронного транспорта как на этапе создания структур сверхмалых размеров (положение уровней энергии и величины кулоновского взаимодействия определяются формой и размером систем), так и при интеграции этих структур в современные модули для наноэлектроники (величины скоростей релаксации в состояния непрерывного спектра).

§ 4.4. Зарядовые и спиновые конфигурации в связанных квантовых точках, индуцированные протеканием туннельного тока

Рассмотрим процессы туннелирования через систему, состоящую из двух сильно связанных квантовых точек с одночастичными уровнями энергии $\tilde{\varepsilon}_1$ и $\tilde{\varepsilon}_2$ (величина связи квантовых точек друг с другом значительно превосходит величины связей каждой из точек с состояниями непрерывного спектра резервуара) [284]. В такой системе могут одновременно находиться от одного до четырех электронов. В общем случае изменение числа электронов в системе не приводит к простому изменению энергетического спектра системы на величину кулоновского взаимодействия U , а вызывает перенормировку полного спектра системы. Исходный энергетический спектр системы двух связанных квантовых точек с одним, двумя, тремя и четырьмя электронами может быть вычислен точно. Переходы между состояниями с фиксированным полным зарядом и проекцией спина можно проанализировать с помощью псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы [183, 184]. Гамильтониан системы имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\sigma} a_{1\sigma}^+ a_{1\sigma} \tilde{\varepsilon}_1 + \sum_{\sigma} a_{2\sigma}^+ a_{2\sigma} \tilde{\varepsilon}_2 + U_1 \hat{n}_{1\sigma} \hat{n}_{1-\sigma} + \\ & + U_2 \hat{n}_{2\sigma} \hat{n}_{2-\sigma} + \sum_{\sigma} T (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Оператор $a_{i\sigma}$ описывает рождение электрона на уровне энергии квантовой точки i со спином σ , $\tilde{\varepsilon}_i$ - энергия одноэлектронного уровня в квантовой точке, T - амплитуда туннельных переходов между квантовыми точками. $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}$ и $U_{1,2}$ - кулоновское взаимодействие локализованных электронов. Для простоты далее будем рассматривать случай, когда туннелирование между точками происходит резонансным образом, а величины

кулоновского взаимодействия в каждой точке имеют одинаковые значения, следовательно выполнены условия $\tilde{\varepsilon}_1 = \tilde{\varepsilon}_2 = \varepsilon_0$ и $U_1 = U_2 = U$. Когда величина взаимодействия между точками превосходит величины взаимодействия каждой из точек с состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта, необходимо использовать базис точных собственных функций и собственных значений связанных квантовых точек без учета взаимодействия с берегами. В этом случае известны все энергии одно- и многоэлектронных состояний:

Если в системе находится один электрон, то существует два одноэлектронных уровня с энергиями $\varepsilon_i = \varepsilon_0 \pm T$ и волновая функция может быть записана в виде:

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot (|0 \uparrow\rangle|00\rangle \pm |00\rangle|0 \uparrow\rangle) \quad (4.50)$$

Если в системе находятся два электрона, то существует два двухэлектронных состояния с одинаковыми спинами $\sigma\sigma$ и $-\sigma-\sigma$ (триплетное состояние имеет проекцию спина $S_Z = \pm 1$) с энергией $2\varepsilon_0$ и четыре двухэлектронных состояния с противоположными спинами $\sigma-\sigma$ и различными значениями энергии $E_{IIj}^{\sigma\sigma'}$: $2\varepsilon_0$; $2\varepsilon_0 + U$ и $2\varepsilon_0 \pm \frac{U}{2} + \sqrt{\frac{U^2}{4} + 4T^2}$. Волновые функции имеют вид:

$$\begin{aligned} \psi_j^{\sigma-\sigma} = & \alpha \cdot |\uparrow\downarrow\rangle|00\rangle - \beta \cdot |\downarrow 0\rangle|0 \uparrow\rangle + \\ & + \gamma \cdot |0 \uparrow\rangle|\downarrow 0\rangle + \delta \cdot |00\rangle|\uparrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (4.51)$$

Если в системе находятся три электрона, то существует два трехэлектронных состояния с энергиями $E_{III}^{m\sigma} = 3\varepsilon_0 + U \pm T$, а волновая функция может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} \psi_{m\sigma} = & \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot |\downarrow 0\rangle|\downarrow 0\rangle \cdot (|0 \uparrow\rangle|00\rangle \pm |00\rangle|0 \uparrow\rangle) \\ m = & \pm 1 \end{aligned} \quad (4.52)$$

Если в системе находятся четыре электрона, то существует единственное четырехэлектронное состояние с энергией $E_{IV} = 4\varepsilon_0 + 2U$ и волновой функцией:

$$\psi_l = |\uparrow\downarrow\rangle|\uparrow\downarrow\rangle \quad (4.53)$$

Для слабосвязанных квантовых точек собственные энергии и собственные функции индивидуальных точек можно использовать в качестве базисных состояний [191].

Если связанные квантовые точки взаимодействуют с берегами туннельного контакта, то число электронов в системе изменяется в результате протекания туннельного тока. Переходы между состояниями с фиксированным полным зарядом и проекцией спина можно проанализировать с помощью псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы. Следовательно, электронный оператор c_σ^+ можно записать через псевдочастичные операторы следующим образом:

$$\begin{aligned} c_\sigma^+ = & \sum_i f_{\sigma i}^+ b + \sum_{j,i} d_j^{+\sigma-\sigma} f_{i-\sigma} + \sum_{j,i} d_j^{+\sigma\sigma} f_{i\sigma} + \\ & + \sum_{m,j} \psi_{m-\sigma}^+ d_j^{\sigma-\sigma} + \sum_{m,j} \psi_{m\sigma}^+ d_j^{-\sigma-\sigma} + \sum_l \varphi_l^+ \psi_{m\sigma} \end{aligned} \quad (4.54)$$

где $f_\sigma^+(f_\sigma)$ и $\psi_\sigma^+(\psi_\sigma)$ - псевдофермионные операторы рождения (уничтожения) для электронных состояний с одним и тремя электронами соответственно. $b^+(b)$, $d_\sigma^+(d_\sigma)$ и $\varphi^+(\varphi)$ - слэив-бозонные операторы, которые соответствуют пустым состояниям без электронов, состояниям с двумя электронами или четырьмя электронами. Операторы $\psi_{m-\sigma}^+$ описывают систему с двумя электронами со спином вверх σ и одним электроном со спином вниз $-\sigma$ в симметричном и антисимметричном состояниях.

Ограничение на пространство возможных физических состояний системы имеет вид:

$$\hat{n}_b + \sum_{i\sigma} \hat{n}_{fi\sigma} + \sum_{j\sigma\sigma'} \hat{n}_{dj}^{\sigma\sigma'} + \sum_{m\sigma} \hat{n}_{\psi m\sigma} + \hat{n}_\varphi = 1 \quad (4.55)$$

Условие (4.55) означает невозможность одновременного появления в системе любых двух псевдочастиц.

Электронные числа заполнения можно выразить через псевдочастичные числа заполнения:

$$\begin{aligned}\hat{n}_\sigma^{el} &= c_\sigma^+ c_\sigma = \sum_i \hat{n}_{fi\sigma} + \sum_{ij} \hat{n}_{dj}^{\sigma-\sigma} + \sum_{ij} \hat{n}_{dj}^{\sigma\sigma} + \\ &+ \sum_{mj} \hat{n}_{\psi m-\sigma} + \sum_{mj} \hat{n}_{\psi m\sigma} + \sum_m \hat{n}_{\varphi l}\end{aligned}\quad (4.56)$$

Следовательно, гамильтониан системы, записанный в терминах псевдочастичных операторов, имеет вид:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{i\sigma} \varepsilon_i f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \sum_{j\sigma\sigma'} E_{IIj}^{\sigma\sigma'} d_j^{+\sigma\sigma'} d_j^{\sigma\sigma'} + \sum_{m\sigma} E_{III}^{m\sigma} \psi_{m\sigma}^+ \psi_{m\sigma} + E_{IVl} \varphi_{l\sigma}^+ \varphi_{l\sigma} + \\ &+ \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{p\sigma} (\varepsilon_{p\sigma} - eV) c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} + \sum_{k\sigma} T_k (c_{k\sigma}^+ c_\sigma + c_\sigma^+ c_{k\sigma}) + (k \leftrightarrow p)\end{aligned}\quad (4.57)$$

где ε_i , $E_{IIj}^{\sigma\sigma'}$, $E_{III}^{m\sigma}$ и E_{IV} - энергии одно-, двух-, трех- и четырех-электронных состояний. $\varepsilon_{k(p)\sigma}$ - энергия электронов в состояниях непрерывного спектра k и p соответственно. $c_{k(p)\sigma}^+ / c_{k(p)\sigma}$ операторы рождения (уничтожения) в берегах туннельного контакта. $T_{k(p)}$ - туннельные амплитуды, не зависящие от импульса и спина. Индексы $k(p)$ означают, что туннелирование происходит из квантовых точек в состояния непрерывного спектра k и p соответственно.

Выражение для туннельного тока, протекающего через рассматриваемую систему, записанное с помощью формализма псевдочастичных операторов, имеет вид:

$$\begin{aligned}\hat{I}_{k\sigma} &= \sum_k \frac{\partial \hat{n}_k}{\partial t} = i \left[\sum_{ik} T_k c_{k\sigma} f_{i\sigma}^+ b + \sum_{ijk} T_k c_{k\sigma} d_j^{+\sigma-\sigma} f_{i-\sigma} + \right. \\ &+ \sum_{ijk} T_k c_{k\sigma} d_j^{+\sigma\sigma} f_{i\sigma} + \sum_{mjk} T_k c_{k\sigma} \psi_{m-\sigma}^+ d_j^{\sigma-\sigma} + \\ &\left. + \sum_{mjk} T_k c_{k\sigma} \psi_{m\sigma}^+ d_j^{-\sigma-\sigma} + \sum_{mk} T_k c_{k\sigma} \varphi_l^+ \psi_{m\sigma} - h.c. \right]\end{aligned}\quad (4.58)$$

Положим везде далее $\hbar = 1$ и будем пренебрегать изменениями электронного спектра и локальной плотности состояний в берегах туннельного контакта, вызванными протеканием туннельного тока. Уравнения движения вместе с ограничением на пространство физических состояний (число псевдочастиц) (4.55) позволяют получить следующие уравнения:

$$\begin{aligned}
Im \sum_{ik} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} f_{i\sigma}^+ b \rangle &= \Gamma_k \sum_i [(1 - n_{k\sigma}(\varepsilon_i)) \cdot n_{fi\sigma} - n_{k\sigma}(\varepsilon_i) \cdot n_b] \\
Im \sum_{ijk} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} d_j^{+\sigma-\sigma} f_{i-\sigma} \rangle &= \Gamma_k \sum_{ij} [(1 - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_{i-\sigma})) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma} - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_{i-\sigma}) \cdot n_{fi-\sigma}] \\
Im \sum_{ijk} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} d_j^{+\sigma\sigma} f_{i\sigma} \rangle &= \Gamma_k \sum_{ij} [(1 - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_{i\sigma})) \cdot n_{dj}^{\sigma\sigma} - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_{i\sigma}) \cdot n_{fi\sigma}] \\
Im \sum_{mjk} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} \psi_{m-\sigma}^+ d_j^{\sigma-\sigma} \rangle &= \Gamma_k \sum_{mj} [(1 - n_{k\sigma}(E_{III}^{m-\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma})) \cdot n_{\psi_{m-\sigma}} - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{III}^{m-\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma}) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma}] \\
Im \sum_{mjk} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} \psi_{m\sigma}^+ d_j^{-\sigma-\sigma} \rangle &= \Gamma_k \sum_{mj} [(1 - n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{-\sigma-\sigma})) \cdot n_{\psi_{m\sigma}} - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{-\sigma-\sigma}) \cdot n_{dj}^{-\sigma-\sigma}] \\
Im \sum_{mk} T_k \cdot \langle c_{k\sigma} \varphi_l^+ \psi_{m\sigma} \rangle &= \Gamma_k \sum_m [(1 - n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma})) \cdot n_\varphi - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma}) \cdot n_{\psi_{m\sigma}}] \tag{4.59}
\end{aligned}$$

Туннельный ток $I_{k\sigma}$ определяется суммой правых частей уравнений, входящих в систему (4.59). Псевдочастичные числа заполнения n_{fi} , $n_{dj}^{\sigma-\sigma}$, $n_d^{\sigma\sigma}$, $n_{\psi_{m\sigma}}$ and n_φ определяются из стационарной системы уравнений:

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial n_\varphi}{\partial t} = -\Gamma_k \sum_{m\sigma} [-n_{\psi_{m\sigma}} \cdot n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma}) + \\
&\quad + n_\varphi \cdot (1 - n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma}))] + (k \leftrightarrow p) \\
0 &= \frac{\partial n_{\psi_{m\sigma}}}{\partial t} = -\Gamma_k \sum_j [n_{\psi_{m\sigma}} \cdot (1 - n_{k-\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma})) - \\
&\quad - n_{k-\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma}) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma}] - \\
&\quad - \Gamma_k \sum_j [(1 - n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{-\sigma-\sigma})) \cdot n_{\psi_{m\sigma}} - \\
&\quad - n_{dj}^{-\sigma-\sigma} \cdot n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{-\sigma-\sigma})] - \\
&\quad - \Gamma_k [-(1 - n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma})) \cdot n_\varphi + \\
&\quad + n_{\psi_{m\sigma}} \cdot n_{k\sigma}(E_{IVl} - E_{III}^{m\sigma})] + (k \leftrightarrow p) \\
0 &= \frac{\partial n_{dj}^{\sigma\sigma}}{\partial t} = -\Gamma_k \sum_i [(1 - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_i)) \cdot n_{dj}^{\sigma\sigma} - \\
&\quad - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_i) \cdot n_{fi\sigma}] - \\
&\quad - \Gamma_k \sum_m [n_{k-\sigma}(E_{III}^{m-\sigma} - E_{IIj}^{\sigma\sigma}) \cdot n_{dj}^{\sigma\sigma} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - (1 - n_{k-\sigma}(E_{III}^{m-\sigma} - E_{IIj}^{\sigma\sigma})) \cdot n_{\psi m-\sigma}] + (k \leftrightarrow p) \\
0 = & \frac{\partial n_{dj}^{\sigma-\sigma}}{\partial t} = -\Gamma_k \sum_{i\sigma} [(1 - n_{k-\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_i)) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma} - \\
& - n_{k-\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_i) \cdot n_{fi\sigma}] - \\
& - \Gamma_k \sum_{m\sigma} [n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma}) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma} - \\
& - (1 - n_{k\sigma}(E_{III}^{m\sigma} - E_{IIj}^{\sigma-\sigma})) \cdot n_{\psi m-\sigma}] + (k \leftrightarrow p) \\
0 = & \frac{\partial n_{fi\sigma}}{\partial t} = \Gamma_k [n_{k\sigma}(\varepsilon_i) \cdot n_b - (1 - n_{k\sigma}(\varepsilon_i)) \cdot n_{fi\sigma}] + \\
& + \Gamma_k \sum_{j\sigma} [(1 - n_{k-\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_i)) \cdot n_{dj}^{\sigma-\sigma} - \\
& - n_{k-\sigma}(E_{IIj}^{\sigma-\sigma} - \varepsilon_i) \cdot n_{fi\sigma}] + \\
& + \Gamma_k \sum_j [(1 - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_i)) \cdot n_{dj}^{\sigma\sigma} - \\
& - n_{k\sigma}(E_{IIj}^{\sigma\sigma} - \varepsilon_i) \cdot n_{fi\sigma}] + (k \leftrightarrow p) \tag{4.60}
\end{aligned}$$

В этих уравнениях не учитываются недиагональные средние от псевдочастичных операторов вида $\langle f_\sigma^+ b d^+ f_\sigma \rangle$. Это члены следующего порядка малости по параметру $\Gamma_{k(p)}/\Delta E$, где ΔE - расстройка между уровнями энергии в квантовых точках. Будем рассматривать парамагнитный случай, когда выполнены условия $n_{fi\sigma} = n_{fi-\sigma}$, $n_{\psi m\sigma} = n_{\psi m-\sigma}$, $n_{k\sigma} = n_{k-\sigma}$ и $n_{dj}^{\sigma-\sigma} = n_{dj}^{\sigma\sigma}$. Система уравнений (4.60) в стационарном случае является линейной, и из нее можно определить псевдочастичные числа заполнения, полные электронные числа заполнения $n_{el}(eV)$ и туннельный ток $I_{k\sigma}$.

Необходимо заметить, что туннельный ток можно проанализировать с использованием электронных операторов рождения (уничтожения) $a_{i\sigma}^+/a_{i\sigma}$ и $c_{k\sigma}^+/c_{k\sigma}$ [157, 283]:

$$I = I_{k\sigma} = I_{k\sigma} = t_k (\langle c_{k\sigma}^+ a_{1\sigma} \rangle - \langle a_{1\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle) \tag{4.61}$$

С помощью уравнений движения [157, 283] можно получить систему уравнений, которая точно учитывает корреляции локализованных электронов во всех порядках по взаимодействию для случая слабой связи с берегами туннельного контакта. Но в таком подходе практически невозможно получить информацию о зарядовых и спиновых конфигурациях состояний системы с различным числом электронов. Таким образом, метод, основанный на применении псевдочастичных операторов, является наиболее подходящим для исследования заполнения многоэлектронных состояний с

определенными зарядовыми и спиновыми конфигурациями.

Результаты расчетов полных электронных чисел заполнения и вольт-амперных характеристик связанных квантовых точек в зависимости от соотношений между параметрами системы: взаимного расположения одноэлектронных уровней энергии относительно уровня Ферми, величин кулоновского взаимодействия между локализованными электронами и скоростей релаксации, представлены на рис.4.13-4.15. На рис. 4.16-4.18 приведены зависимости заполнения двухэлектронных состояний с различными спиновыми конфигурациями (синглетного и триплетного состояний) в зависимости от напряжения на туннельном контакте.

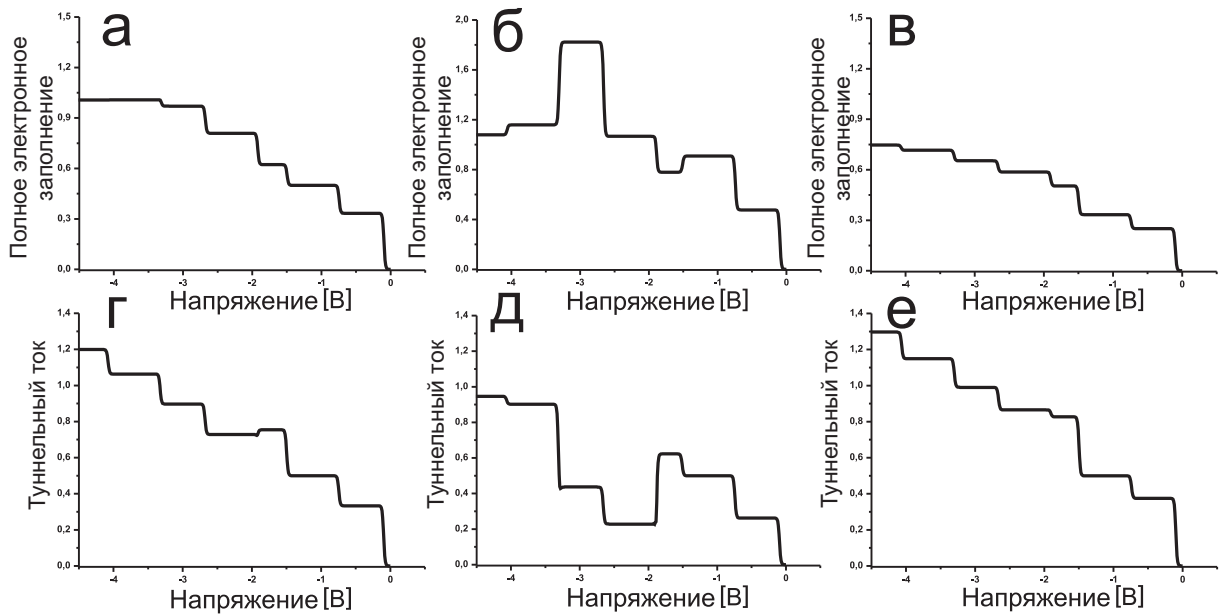


Рис. 4.13. а).-в). Зависимости полного электронного заполнения квантовых точек г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon = 0,80$, $T = 0,70$, $U = 1,85$ одинаковы для всех графиков. а).,г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б).,д). $\Gamma_k = 0,10$, $\Gamma_p = 0,01$; в).,е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$.

Представленные на рис.4.13-4.18 результаты демонстрируют такие общие особенности рассматриваемой системы, как перераспределение заряда в системе между состояниями с различными спиновыми конфигурациями при изменении напряжения и ступенчатую структуру вольт-амперных характеристик с неэквидистантными ступенями, соответствующими энергиям различных многоэлектронных состояний в квантовых точках. Проанализируем более подробно представленные на рис.4.13-4.18 зависимости для различных значений параметров исследуемой системы.

Рассмотрим сначала поведение полных электронных чисел запол-

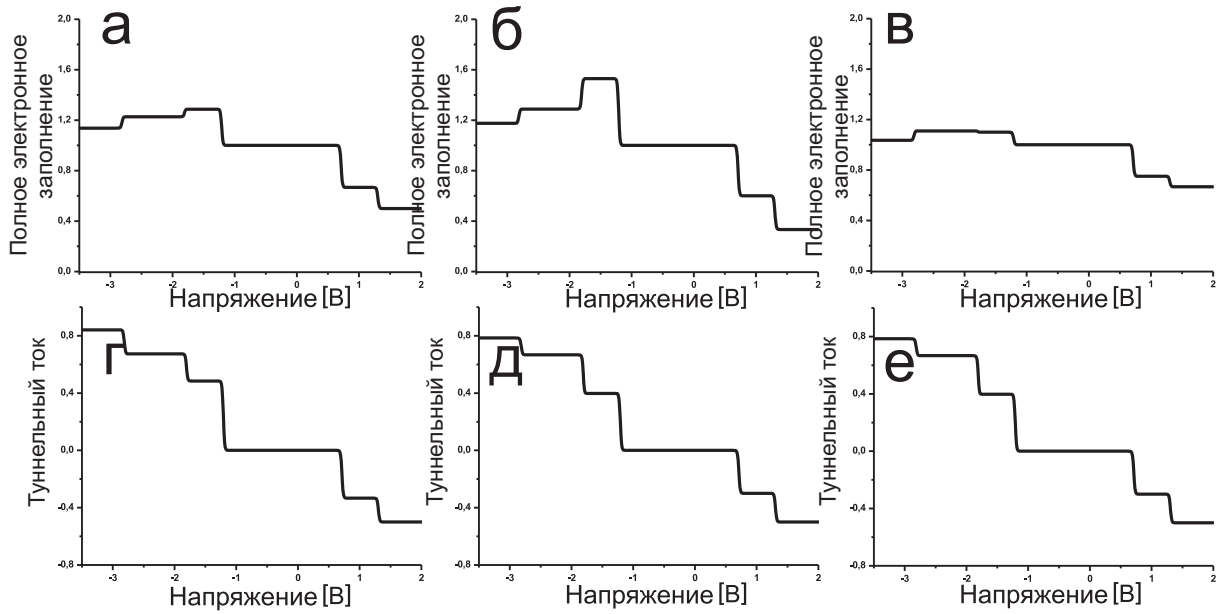


Рис. 4.14. а).-в). Зависимости полного электронного заполнения квантовых точек г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой- ниже. Значения параметров $\varepsilon = -0,50$, $T = 0,80$, $U = 1,50$ одинаковы для всех графиков. а).,г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б).,д). $\Gamma_k = 0,02$, $\Gamma_p = 0,01$; в).,е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$.

нения связанных квантовых точек и их вольт-амперных характеристик для различных положений одноэлектронных уровней энергии относительно уровня Ферми образца и различных величин скоростей релаксации в берега туннельного контакта (рис.4.13-4.15). При расчетах учтено, что напряжение смещения приложено к образцу. То есть, если оба уровня энергии расположены выше(ниже) уровня Ферми, то все особенности, возникающие в зависимостях чисел заполнения и туннельного тока от напряжения, наблюдаются при отрицательных(положительных) значениях eV .

В случае, когда оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми (рис.4.13а-в) зависимости полных электронных чисел заполнения имеют ступенчатую структуру как в симметричном ($\Gamma_k = \Gamma_p$), так и в асимметричном туннельном контакте, когда скорость ухода электронов в состояния непрерывного спектра превосходит скорость прихода ($\Gamma_k < \Gamma_p$) (рис.4.13а,в). Ступенчатая структура наблюдается и для слабого ($U \sim T$) и для сильного кулоновского взаимодействия между локализованными в квантовых точках электронами ($U \gg T$). Ширина и высота ступеней определяются соотношениями между параметрами системы T , ε , U и $\Gamma = \Gamma_k + \Gamma_p$. Для асимметричного туннельного контакта, когда скорость прихода электронов из состояний непрерывного спектра превосходит ско-

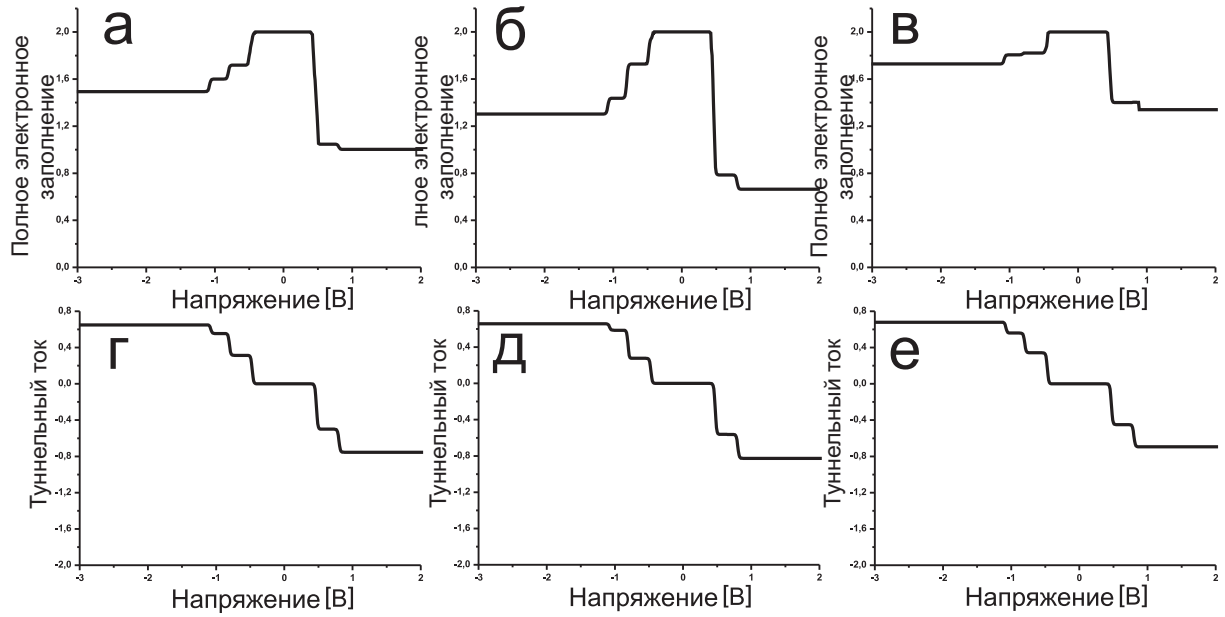


Рис. 4.15. а).-в). Зависимости полного электронного заполнения квантовых точек г).-е). и туннельного тока от напряжения на туннельном контакте для случая, когда оба одно-электронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Значения параметров $\varepsilon = -0,50$, $T = 0,30$, $U = 1,00$ одинаковы для всех графиков. а)., г). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б)., д). $\Gamma_k = 0,02$, $\Gamma_p = 0,01$; в)., е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$.

рость ухода электронов ($\Gamma_k > \Gamma_p$), существуют области напряжений на туннельном контакте, для которых величина полных электронных чисел заполнения демонстрирует резкое уменьшение амплитуды (рис.4.13б).

Зависимости туннельного тока от напряжения на контакте для случая, когда оба уровня энергии расположены выше уровня Ферми, представлены на рис.4.13г-е (амплитуда туннельного тока для всех зависимостей нормирована на величину $\frac{\Gamma_k \Gamma_p}{\Gamma_k + \Gamma_p}$). В случае асимметричного туннельного контакта, когда скорость ухода электронов в состояния непрерывного спектра превышает скорость прихода ($\Gamma_k < \Gamma_p$), зависимости туннельного тока от напряжения имеют вид лестницы (рис.4.13е). Наличие кулоновского взаимодействия локализованных электронов приводит к существованию областей напряжения на туннельном контакте, для которых наблюдается формирование отрицательной туннельной проводимости. Для достаточно больших величин кулоновского взаимодействия ($U \gg T$) отрицательная туннельная проводимость наблюдается в симметричном туннельном контакте (рис.4.13а).

Наиболее отчетливо образование областей с отрицательной туннельной проводимостью можно проследить в асимметричном туннельном контакте, когда скорость прихода электронов из состояний непрерывного спек-

тра превосходит скорость ухода электронов (рис.4.13б). Этот эффект наблюдался экспериментально в связанных квантовых точках [192] и был предсказан теоретически в системах с магнитными берегами туннельного контакта, которые обладают определенным направлением поляризации [188,190]. Однако в перечисленных работах авторы не наблюдали формирования отрицательной туннельной проводимости в отсутствие поляризации берегов туннельного контакта. Таким образом, для получения отрицательной туннельной проводимости в моделях, представленных в [188,190] были введены специфические ограничения, что не позволяет применять предложенные модели для исследования систем, имеющих перспективу стать базовыми элементами современной наноэлектроники.

В квантовых точках без кулоновского взаимодействия полные электронные числа заполнения всегда возрастают с ростом напряжения на туннельном контакте при прохождении одноэлектронных уровней энергии. Сильное кулоновское взаимодействие между локализованными электронами может значительным образом влиять на поведение полных электронных чисел заполнения. Существуют области напряжений на контакте, для которых полные электронные числа заполнения демонстрируют резкое уменьшение амплитуды с ростом величины напряжения (рис.4.14-4.15а-в). Эффект резкого уменьшения величины полных электронных чисел заполнения наблюдается для любых соотношений между скоростями релаксации в системе и любых величин кулоновского взаимодействия. Равновесное заполнение двухэлектронных состояний при нулевом напряжении на контакте приводит к среднему заполнению в один электрон на спин (полное заполнение для всех спинов равно 2). Когда значение напряжения на туннельном контакте достигает величины энергий возбужденных многоэлектронных состояний, амплитуда полных электронных чисел заполнения резко уменьшается. Используя одноэлектронный язык, можно описать этот эффект следующим образом: дополнительные туннелирующие электроны "выбивают" электроны из состояний, находящихся ниже уровня Ферми, за счет наличия кулоновских корреляций. С другой стороны этот эффект можно рассматривать как увеличение вероятности для электронов протуннелировать из квантовой точки в состояния непрерывного спектра в результате образования нескольких неупругих каналов для туннелирования (сопровождающиеся изменением многоэлектронных состояний квантовых точек). Эффект резкого уменьшения величины полных электронных чисел

заполнения обнаружен впервые.

Зависимости туннельного тока от напряжения на контакте для случаев, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой- ниже, или оба уровня находятся ниже уровня Ферми представлены на рисунках 4.14г-е-4.15г-е и демонстрируют монотонную ступенчатую структуру. В обоих случаях отсутствует ступенька, соответствующая верхнему одноэлектронному состоянию с энергией $\varepsilon_0 + T$.

Другой интересной особенностью, возникающей в системе связанных квантовых точек и обусловленной наличием кулоновских корреляций локализованных электронов, является многократное перераспределение заряда между двумя электронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями (синглетным и триплетным состояниями) при изменении напряжения на туннельном контакте. Исследуем особенности заполнения двухчастичных состояний в связанных квантовых точках с различными спиновыми конфигурациями (рис.4.16-рис.4.18).

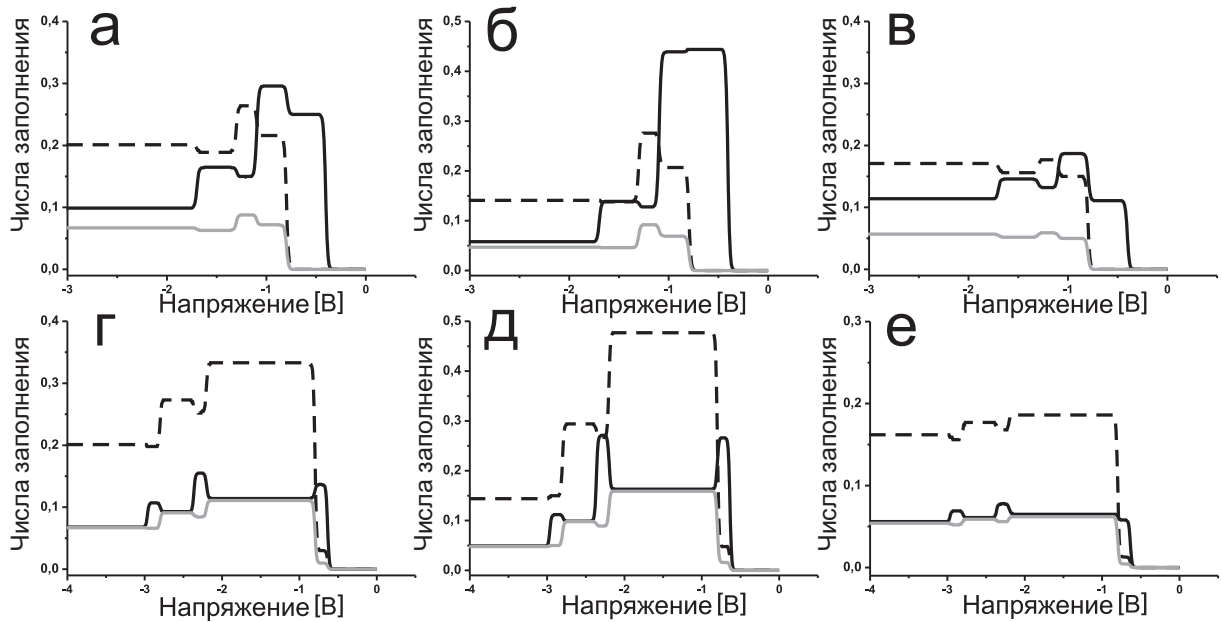


Рис. 4.16. Зависимости заполнения двухэлектронных состояний для различных спиновых конфигураций от напряжения на туннельном контакте для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены выше уровня Ферми образца. Числа заполнения синглетного состояния изображены черным цветом, числа заполнения триплетного состояния с фиксированной проекцией спина-серым цветом, а полное заполнение триплетного состояния изображено черной пунктирной линией. Значения параметров $\varepsilon = 0,50$, $T = 0,30$ одинаковы для всех графиков. а).,з). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б).,д). $\Gamma_k = 0,02$, $\Gamma_p = 0,01$; в).,е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$; а).-в). $U = 0,50$; з).-е). $U = 2,00$.

В случае, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены

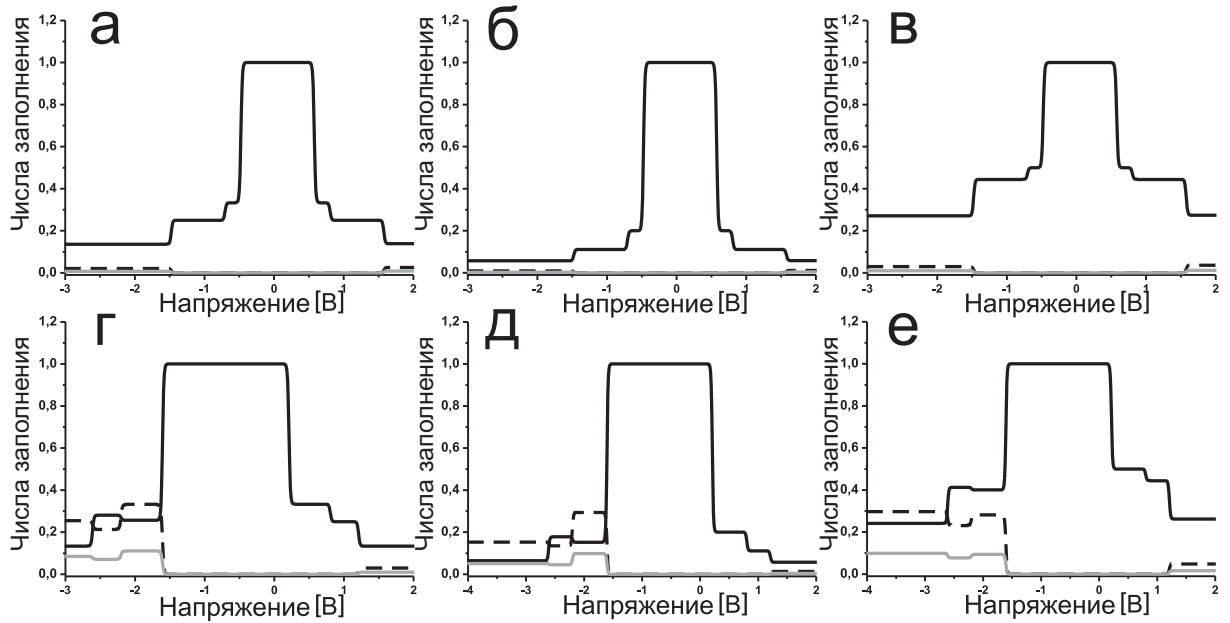


Рис. 4.17. Зависимости заполнения двухэлектронных состояний для различных спиновых конфигураций от напряжения на туннельном контакте для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца, а другой - ниже. Числа заполнения синглетного состояния изображены черным цветом, числа заполнения триплетного состояния с фиксированной проекцией спина - серым цветом, а полное заполнение триплетного состояния изображено черной пунктирной линией. Значения параметров $\varepsilon = -0,30$, $T = 0,50$ одинаковы для всех графиков. а), в). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б), д). $\Gamma_k = 0,02$, $\Gamma_p = 0,01$; в), е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$; а).-в). $U = 0,50$; в).-е). $U = 2,00$.

выше уровня Ферми (рис.4.16), существует несколько областей напряжения на туннельном контакте, для которых заполнение триплетного состояния оказывается больше, чем заполнение синглетного состояния как для случая сильного ($U \gg T$), так и для случая слабого ($U \sim T$) кулоновского взаимодействия. В случае сильного кулоновского взаимодействия заряд в системе в основном локализован в триплетном состоянии практически во всей области напряжений на контакте. Триплетное состояние с фиксированным значением проекции спина в случае слабого кулоновского взаимодействия локализованных электронов заполнено меньше, чем синглетное состояние (рис.4.16а-в). В системе связанных квантовых точек с сильным кулоновским взаимодействием существует четыре области напряжений, для которых заряд одинаково распределен между синглетным состоянием и триплетным состоянием с фиксированной проекцией спина (рис.4.16г-е) для различных соотношений между скоростями туннельных переходов.

На рисунке 4.17 приведены результаты расчетов для случая, когда один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Фер-

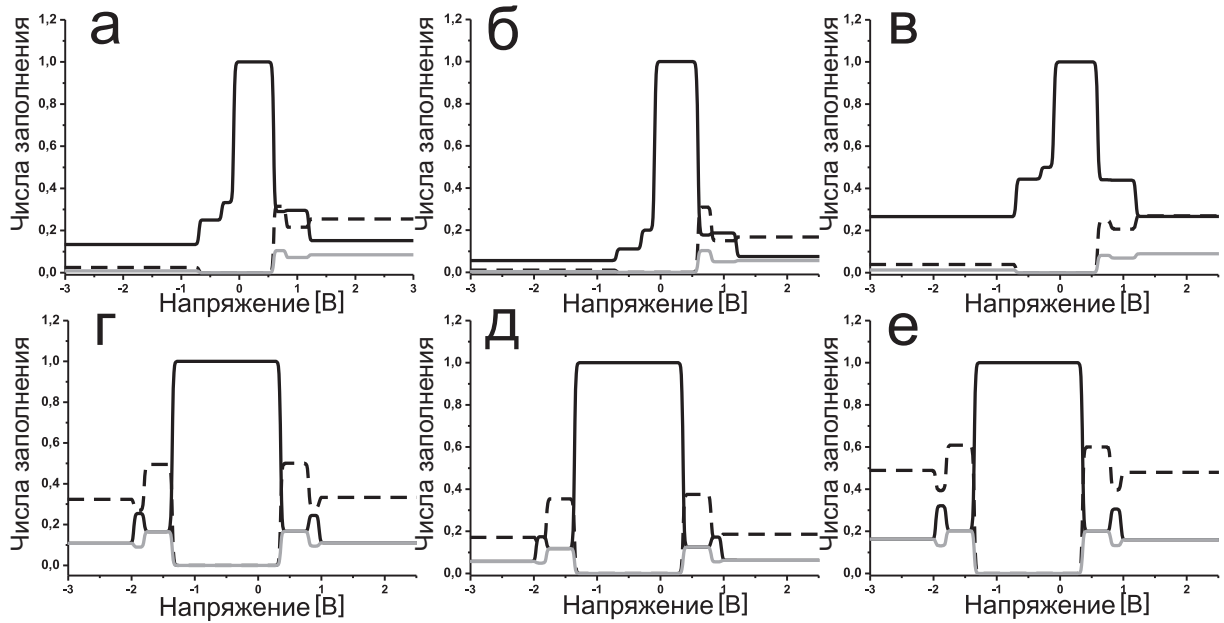


Рис. 4.18. Зависимости заполнения двухэлектронных состояний для различных спиновых конфигураций от напряжения на туннельном контакте для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми образца. Числа заполнения синглетного состояния изображены черным цветом, числа заполнения триплетного состояния с фиксированной проекцией спина - серым цветом, а полное заполнение триплетного состояния изображено черной пунктирной линией. Значения параметров $\varepsilon = -0,50$, $T = 0,30$ одинаковы для всех графиков. а), з). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,01$; б), д). $\Gamma_k = 0,02$, $\Gamma_p = 0,01$; в), е). $\Gamma_k = 0,01$, $\Gamma_p = 0,02$; а).-в). $U = 0,50$; з).-е). $U = 2,00$.

ми, а другой - ниже. В случае слабого кулоновского взаимодействия заряд практически полностью локализован в синглетном состоянии как для симметричного, так и для асимметричного туннельного контактов (рис.4.17а-в).

В случае сильного кулоновского взаимодействия локализованных электронов заряд в системе также практически полностью локализован в синглетном состоянии в широком диапазоне напряжений (рис.4.17г-е), однако существует несколько областей, для которых заполнение триплетного состояния превосходит заполнение синглетного состояния. Для симметричного туннельного контакта триплетное состояние с фиксированной проекцией спина всегда заполнено меньше, чем синглетное состояние.

Результаты расчетов, выполненных для случая, когда оба одноэлектронных уровня энергии расположены ниже уровня Ферми, представлены на рисунке 4.18. В случае слабого кулоновского взаимодействия локализованных электронов существует только одна область напряжений на туннельном контакте, для которой заряд распределен одинаково между синглетным и триплетным состояниями или заполнение триплетного состо-

яния превосходит заполнение синглетного (рис.4.18а-в). Заполнение триплетного состояния с фиксированной проекцией спина всегда меньше, чем заполнение синглетного состояния. С ростом величины кулоновского взаимодействия происходит образование нескольких областей напряжения на туннельном контакте, для которых заполнение триплетного состояния превосходит заполнение синглетного (рис.4.18г-е).

Таким образом, предложен новый метод описания туннельных процессов в системе нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии, основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые записаны для псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы. Показано, что полные электронные числа заполнения в такой системе демонстрируют резкое уменьшение амплитуды с ростом величины напряжения, вызванное кулоновскими корреляциями локализованных электронов.

Обнаружено многократное перераспределение заряда между электронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями при изменении напряжения на туннельном контакте, обусловленным наличием кулоновских корреляций локализованных электронов. Продемонстрирована возможность получения инверсной заселенности.

Описанные эффекты могут быть использованы для формирования заданных зарядовых и спиновых конфигураций в системах нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии. Формирование электронных конфигураций с заданным распределением электронов и спинов позволяет применять такие системы в качестве основы при создании зарядовых и спиновых насосов и турникетов, используемых для контролируемого электронного транспорта.

§ 4.5. Выводы

Исследованы особенности электронного транспорта в наноструктурах при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов, которые приводят к перенормировке исходного спектра исследуемой системы. В результате исследований обнаружено, что кулоновские корреляции локализованных электронов приводят к принципиально новому распределению зарядовой плотности в двухуровневой системе при протекании туннельного тока. Предложен новый подход для описания процессов в такой системе,

основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые могут быть записаны либо для чисел заполнения электронов, локализованных на уровнях, либо для псевдочастичных операторов с ограничением на возможные физические состояния системы. Первый подход позволил получить систему уравнений, которая точно учитывает корреляции локализованных электронов во всех порядках для случая слабой связи с берегами туннельного контакта. Данный подход позволил впервые точно вычислить корреляционные функции всех порядков (парные и тройные) для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии (то есть предложено реалистическое описание систем с сильными кулоновскими корреляциями). Второй подход позволил получить информацию о зарядовых и спиновых конфигурациях состояний с разным числом электронов и проанализировать поведение полных электронного числа заполнения, чисел заполнения отдельных многоэлектронных состояний, а также исследовать туннельные характеристики системы для различных положений одноэлектронных уровней энергии относительно уровня Ферми образца. В частности:

1. Продемонстрировано, что кулоновские корреляции вызывают многократное обратимое перераспределение заряда между электронными состояниями системы. Наличие эффектов перераспределения заряда при изменении напряжения на туннельном контакте означает возможность манипулирования пространственным распределением заряда в системе нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии (аккумуляция заряда и переключение системы между различными зарядовыми состояниями). Эффект контролируемого переключения системы между различными состояниями может быть использован при создании обратимых зарядовых переключателей на базе квантовых точек и локализованных состояний, образованных примесными атомами.
2. Впервые показано, что кулоновские корреляции вызывают формирование инверсной заселенности в двухуровневой системе. Наиболее ярко инверсная заселенность наблюдается в асимметричных туннельных контактах. Изменяя параметры контакта можно наблюдать конкуренцию двух механизмов, отвечающих за неравновесное заполнение уровней энергии: инверсную заселенность, вызванную протеканием

ем через двухуровневую систему туннельного тока, при определенном соотношении между константами релаксации в системе и инверсную заселенность, обусловленную кулоновскими корреляциями локализованных электронов. Инверсная заселенность может быть применена при конструировании квантовых излучателей, генерирующих импульсы определенной частоты.

3. Обнаружены области значений напряжения на туннельном контакте, для которых наблюдается отрицательная туннельная проводимость, как следствие кулоновских корреляций и неравновесных эффектов в области контакта. Показано, что для существования отрицательной туннельной проводимости необходим асимметричный туннельный контакт, в котором хотя бы один из одноэлектронных уровней энергии расположен выше уровня Ферми образца. Таким образом, по виду спектров туннельного тока, измеренных методом СТМ/СТС, можно определить параметры туннельного электронного транспорта в системах сверхмалых размеров.
4. Показано, что полные электронные числа заполнения в системе связанных квантовых точек демонстрируют резкое уменьшение амплитуды с ростом величины напряжения, вызванное кулоновскими корреляциями локализованных электронов, в отличие от случая, когда корреляции отсутствуют.
5. Обнаружено многократное перераспределение заряда между двумя электронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями (синглетным и триплетным состояниями) при изменении напряжения на туннельном контакте, обусловленное наличием кулоновских корреляций локализованных электронов. Выявлено, что для определенных значений параметров системы, заполнение триплетного состояния может превосходить заполнение синглетного состояния (формирование инверсной заселенности).

Описанные в главе эффекты позволяют формировать заданные зарядовые и спиновые конфигурации в системах нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии. Формирование электронных конфигураций с заданным распределением электронов и спинов позволяет применять

такие системы в качестве основы при создании зарядовых и спиновых насосов и турникетов, используемых для контролируемого электронного транспорта, а также исследовать особенности релаксации зарядовых состояний в системах нанометровых размеров с кулоновскими корреляциями, связанных с состояниями непрерывного спектра. Кроме того, показано, что системы сверхмалых размеров с несколькими уровнями энергии можно применять для создания обратимых зарядовых переключателей и устройств динамической памяти, основанных на переключении между несколькими стабильными состояниями.

ГЛАВА 5

Релаксация заряда в системе связанных квантовых точек в отсутствии кулоновских корреляций

Квантовые точки являются уникальными объектами сверхмалых размеров с дискретными уровнями энергии, на которых могут располагаться локализованные электроны, сильно взаимодействующие друг с другом. По этой причине квантовые точки называют искусственными атомами [216]. Связанные квантовые точки (искусственные молекулы [218]) могут быть применены в современной микро- и наноэлектронике для создания приборов сверхмалых размеров, принцип действия которых основан на особенностях электронного транспорта через системы с дискретными уровнями энергии. В таких структурах могут возникать многочастичные эффекты кулоновской блокады или эффект Кондо [23, 145–150, 171, 175, 181, 182]. Одной из наиболее важных задач в этой области является исследование влияния неравновесного распределения заряда, процессов релаксации и нестационарных эффектов на электронный транспорт через одиночные и связанные квантовые точки.

Правильная интерпретация квантовых эффектов в точках сверхмалых размеров позволит создавать высокоскоростные электронные и логические приборы. Таким образом, задача об исследовании особенностей релаксации заряда, локализованного в одиночных и связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра как в отсутствие, так и при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов, является актуальной и представляет интерес и с фундаментальной и с практической точек зрения.

В настоящей главе будут рассмотрены особенности релаксации заряда, локализованного в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра без учета кулоновского взаимодействия между локализованными электронами [285, 286]. Кулоновское взаимодействие в квантовых точках можно не учитывать в случае неглубоких

квантовых точек большого размера с мелкими уровнями энергии [150, 284].

§ 5.1. Нестационарные процессы в одиночной квантовой точке, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра резервуара

Исследование процессов релаксации заряда в квантовых точках без учета кулоновского взаимодействия, связанных с состояниями непрерывного спектра резервуара, позволяет проанализировать роль состояний резервуара в формировании особенностей электронного транспорта. Такие исследования представляются важными, так как на базе квантовых точек, интегрированных в полупроводниковую матрицу, а следовательно, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, можно создавать устройства для высокоскоростного и высокоточного электронного транспорта. Такие системы могут быть использованы в качестве модулей при создании одноэлектронных квантовых насосов и турникетов, а также высокочастотных усилителей. Исследуем процессы релаксации заряда в одиночной квантовой точке, взаимодействующей с электронным резервуаром через туннельный барьер (электроны проводимости непрерывного спектра находятся в состояниях с энергиями ε_k). Будем рассматривать ситуацию, когда расстояние между одноэлектронными уровнями является наибольшим энергетическим параметром в системе. В этом случае можно считать, что квантовая точка одноуровневая с вырожденным по спину уровнем энергии ε_1 . Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_1 c_{1\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k,\sigma} T_k (c_{k\sigma}^{\dagger} c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}) \quad (5.1)$$

где T_k - амплитуда туннельных переходов между локализованным состоянием в квантовой точке и состояниями непрерывного спектра. Операторы $c_{1\sigma}^{\dagger}/c_{1\sigma}$ и $c_{k\sigma}^{\dagger}/c_{k\sigma}$ соответствуют рождению/уничтожению электронов со спином σ на уровне энергии ε_1 и в состояниях непрерывного спектра соответственно.

Пусть в начальный момент времени вся плотность заряда в системе локализована на уровне энергии ε_1 квантовой точки и имеет величину $n_1(0) = n_0$. Для описания релаксации зарядовой плотности в рассматриваемой системе используем диаграммную технику Келдыша для неравновес-

ных процессов [67]. Временная эволюция электронной плотности в квантовой точке определяется келдышевской функцией Грина $G_{11}^<(t, t')$, которая связана с числами заполнения на уровне энергии ε_1 следующим образом:

$$G_{11}^<(t, t) = in_1(t). \quad (5.2)$$

Функция $G_{11}^<(t, t')$ может быть определена из системы интегро-дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R-1}G_{11}^<(t, t') &= \sum_k T_k G_{k1}^<(t, t') \\ G_{k1}^<(t, t') &= G_{kk}^{0<}T_k G_{11}^A(t, t') + G_{kk}^{0R}T_k G_{11}^<(t, t') \end{aligned} \quad (5.3)$$

из системы уравнений (5.3) можно получить следующее уравнение:

$$(G_{11}^{0R-1} - \sum_k T_k^2 G_{kk}^{0R})G_{11}^<(t, t') = \sum_k T_k^2 G_{kk}^{0<}G_{11}^A(t, t') \quad (5.4)$$

где функция Грина состояний непрерывного спектра $G_{kk}^{0R}(t, t')$ и обратная функция Грина локализованного состояния G_{11}^{0R-1} в отсутствие туннельных процессов в системе могут быть записаны в виде:

$$\begin{aligned} G_{kk}^{0R}(t, t') &= \Theta(t - t')e^{-i\varepsilon_k(t-t')} \\ G_{11}^{0R-1} &= i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_1 \end{aligned} \quad (5.5)$$

В выражении (5.4) выполним интегрирование по промежуточным временным аргументам. Решение уравнения (5.4) можно записать в виде:

$$\begin{aligned} G_{11}^<(t, t) &= n_1(0)e^{-2\gamma_1 t} + \sum_k \int_0^t \int_0^t \Theta(t - t_1)\Theta(t - t_2)dt_1 dt_2 \times \\ &\quad \times f(\varepsilon_k)e^{-i\varepsilon_k(t_1-t_2)} \cdot e^{-i\tilde{\varepsilon}_1(t-t_1)} e^{i\tilde{\varepsilon}_1^*(t-t_2)} \end{aligned} \quad (5.6)$$

где использованы следующие обозначения

$$\begin{aligned} \sum_k T_k^2 G_{kk}^{0R} &= -i\gamma_1 = -i\pi T_k^2 \nu_k^0 \\ \tilde{\varepsilon}_1 &= \varepsilon_1 - i\gamma_1 \end{aligned} \quad (5.7)$$

ν_k^0 - плотность состояний непрерывного спектра, не зависящая от энергии, $f(\omega)$ - функция распределения Ферми.

Производя интегрирование в выражении (5.6) и заменяя суммирование по индексу k на интегрирование по энергии ω , получим конечное выражение, которое описывает временную эволюцию чисел заполнения в квантовой точке, связанной с состояниями непрерывного спектра:

$$n_1(t) = n_1(0)e^{-2\gamma_1 t} + \frac{1}{\pi} \int d\omega f(\omega) \frac{\gamma_1}{(\omega - \varepsilon_1)^2 + \gamma_1^2} \times \\ \times (1 + e^{-2\gamma_1 t} - 2 \cos((\omega - \varepsilon_1)t) e^{-\gamma_1 t}) \quad (5.8)$$

Таким образом, из полученного выражения для временной эволюции чисел заполнения (5.8) следует, что в общем случае релаксация заряда в квантовой точке отличается от простого экспоненциального закона даже в отсутствии кулоновского взаимодействия (рис.5.1).

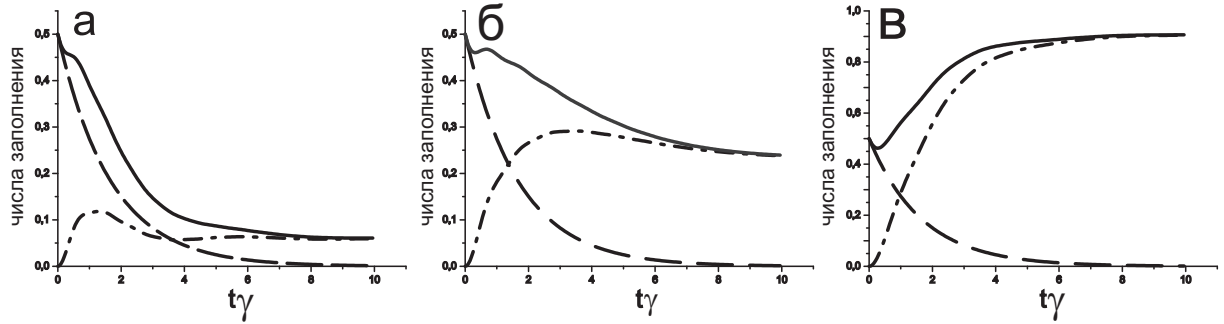


Рис. 5.1. Временная эволюция чисел заполнения в квантовой точке, связанной с состояниями непрерывного спектра. Сплошная линия: Временная эволюция чисел заполнения локализованных электронов в случае, когда учтена функция распределения электронов в состояниях непрерывного спектра. Пунктирная линия: Временная эволюция чисел заполнения локализованных электронов в случае, когда не учитывается вклад от многочастичных эффектов электронов проводимости. Штрих-пунктирная линия: Временная эволюция чисел заполнения в случае, когда учитываются многочастичные эффекты, вызванные учетом распределения электронов в состояниях непрерывного спектра. а). $\varepsilon_1 = 1, 3$; б). $\varepsilon_1 = 0, 3$; в). $\varepsilon_1 = -1, 3$. Параметр $\gamma_1 = 0, 3$ имеет одно и то же значение для всех рисунков.

На рисунке 5.1 показана временная эволюция электронных чисел заполнения для различных положений уровня энергии квантовой точки. При наличии фермиевского распределения электронов в состояниях непрерывного спектра временная эволюция электронной плотности локализованного состояния существенно отличается от экспоненциального закона, особенно в случае, когда выполнено условие: $|\varepsilon_1 - \varepsilon_F| \leq \gamma_1$ (сплошная линия на рис.5.1). При малых временах $t \leq \frac{1}{|\varepsilon_1 - \varepsilon_F|}$ это отличие проявляется и в случае, когда уровень энергии расположен значительно выше уровня Ферми

$|\varepsilon_1 - \varepsilon_F| \gg \gamma_1$. В случае, когда можно пренебречь вкладом от многочастичных эффектов в состояниях непрерывного спектра, релаксация заряда происходит по обычному экспоненциальному закону (пунктирная линия на рис.5.1). Вклад только от многочастичных эффектов, связанных с электронами в состояниях непрерывного спектра показан штрих-пунктирной линией на рис.5.1.

При больших временах $t \rightarrow \infty$ в системе устанавливается стационарное распределение электронной плотности:

$$n_{1st} = \int d\omega f(\omega) \frac{\gamma_1}{(\omega - \varepsilon_1)^2 + \gamma_1^2} \quad (5.9)$$

Таким образом, релаксация заряда в квантовой точке определяется не только параметрами самой точки, но и ее окружением (распределением электронов проводимости в состояниях непрерывного спектра окружения). Следовательно, в случае использования квантовых точек в качестве элементов для микро- и наноэлектроники на параметры зарядового транспорта будет влиять как конфигурация самой квантовой точки, так и свойства полупроводниковой матрицы.

§ 5.2. Нестационарные процессы в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара

Возникновение нетривиальных режимов релаксации возможно не в одной квантовой точке, а в связанных точках. В таких системах проявляются нелинейные эффекты, а также возможно образование нескольких каналов для релаксации. Связанные квантовые точки можно использовать при создании зарядовых переключателей, квантовых насосов или зарядовых ловушек. Рассмотрим релаксацию заряда в системе двух связанных квантовых точек с одноэлектронными уровнями энергии ε_1 и ε_2 соответственно (рис.5.2). Квантовая точка с уровнем энергии ε_2 связана с состояниями непрерывного спектра резервуара. Тогда гамильтониан исследуемой системы будет иметь вид:

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_1 c_{1\sigma}^+ c_{1\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_2 c_{2\sigma}^+ c_{2\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} +$$

$$+ \sum_{\sigma} T(c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \sum_{k,\sigma} T_k(c_{k\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{k\sigma}) \quad (5.10)$$

где T - амплитуда туннельных переходов между уровнями энергии первой и второй точек. T_k - амплитуда туннельных переходов между локализованным во второй квантовой точке состоянием с энергией ε_2 и состояниями непрерывного спектра. $c_{1\sigma}^+/c_{1\sigma}$ ($c_{2\sigma}^+/c_{2\sigma}$) и $c_{k\sigma}^+/c_{k\sigma}$ - операторы рождения/уничтожения электронов со спином σ на уровне энергии ε_1 (ε_2) первой (второй) квантовой точки и в состояниях непрерывного спектра (k) соответственно.

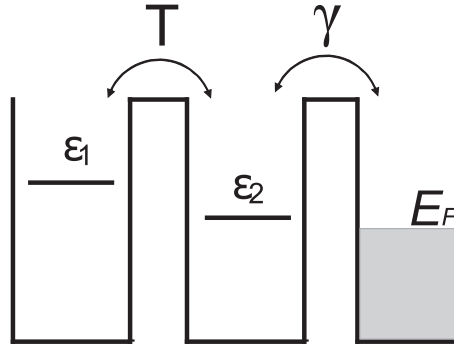


Рис. 5.2. Схематическое изображение уровней энергии в системе связанных квантовых точек. Квантовая точка с уровнем энергии ε_2 (вторая) взаимодействует с состояниями непрерывного спектра.

Пусть в начальный момент времени вся плотность заряда в системе локализована в первой квантовой точке на уровне энергии ε_1 и имеет величину $n_1(0)$. В первую очередь для анализа процессов релаксации необходимо вычислить точные запаздывающие функции Грина для каждой из квантовых точек. В отсутствии взаимодействия между квантовыми точками функции Грина $G_{11}^{0R}(t-t')$ и $G_{22}^{0R}(t-t')$ определяются выражениями:

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R}(t-t') &= -i\Theta(t-t')e^{-i\varepsilon_1(t-t')} \\ G_{22}^{0R}(t-t') &= -i\Theta(t-t')e^{-i\varepsilon_2(t-t')-\gamma(t-t')} \end{aligned} \quad (5.11)$$

где $\gamma = \pi\nu_k^0 T_k^2$ скорость релаксации заряда из второй квантовой точки в состояния непрерывного спектра. Запаздывающая функция Грина для электронов G_{11}^R определяет плотность состояний в первой точке и может быть вычислена с помощью интегрального уравнения:

$$G_{11}^R = G_{11}^{0R} + G_{11}^{0R} T^2 G_{22}^{0R} G_{11}^R \quad (5.12)$$

которое представимо в эквивалентной дифференциальной форме:

$$(G_{11}^{0R-1} - T^2 G_{22}^R) G_{11}^R = \delta(t - t') \quad (5.13)$$

$$(G_{22}^{R-1} G_{11}^{0R-1} - T^2) G_{11}^R(t, t') = 0 \quad (5.14)$$

при $(t \neq t')$

$$\left(\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_2 + i\gamma \right) \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_1 \right) - T^2 \right) G_{11}^R(t, t') = 0 \quad (5.15)$$

Следовательно, решая уравнение (5.15), получим временную зависимость для функции Грина $G_{11}^R(t, t')$:

$$G_{11}^R(t, t') \sim e^{-iE_{1,2}(t-t')} \quad (5.16)$$

Собственные частоты $E_{1,2}$ уравнения (5.12) можно определить из следующего уравнения:

$$\begin{aligned} (E - \varepsilon_1)(E - \varepsilon_2 + i\gamma) - T^2 &= 0 \\ E_{1,2} &= \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - i\gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + i\gamma)^2 + 4T^2} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Запаздывающая функция Грина, определяющая изменение спектра, вызванное межчастичным взаимодействием, имеет вид:

$$G_{11}^R(t, t') = i\Theta(t - t') \left(\frac{E_1 - \varepsilon_2 + i\gamma}{E_1 - E_2} e^{-iE_1(t-t')} - \frac{E_2 - \varepsilon_2 + i\gamma}{E_1 - E_2} e^{-iE_2(t-t')} \right) \quad (5.18)$$

Зная явный вид выражения для запаздывающей функции Грина (5.18), рассмотрим как будет изменяться со временем электронная плотность исследуемой системы, временная эволюция которой определяется келдышевской функцией Грина $G_{11}^<(t, t')$ при совпадающих временных аргументах.

$$G_{11}^<(t, t) = in_1(t) \quad (5.19)$$

Уравнение для функции $G_{11}^<$ имеет вид:

$$G_{11}^<(t, t') = G_{11}^{0<} + G_{11}^{0<}T^2G_{22}^{0A}G_{11}^A + G_{11}^{0R}T^2G_{22}^{0R}G_{11}^< + G_{11}^{0R}T^2G_{22}^{0<}G_{11}^A \quad (5.20)$$

Действуя слева оператором G_{11}^{0R-1} , перепишем уравнение (5.20) в виде:

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R-1}G_{11}^<(t, t') &= (i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_1)G_{11}^<(t, t') = T^2 \int_0^\infty dt_1 G_{22}^{0R}(t, t_1)G_{11}^<(t_1, t') + \\ &+ T^2 \int_0^\infty dt_1 G_{22}^{0<}(t, t_1)G_{11}^A(t_1, t'), \end{aligned} \quad (5.21)$$

Уравнение (5.21) можно записать в более компактной форме:

$$(G_{11}^{0R-1} - T^2G_{22}^{0R})G_{11}^< = T^2G_{22}^{0<}G_{11}^A \quad (5.22)$$

Функция Грина $G_{11}^<$ определяется суммой однородного и неоднородного решений уравнения (5.22). Неоднородное решение уравнения имеет вид:

$$G_{11}^<(t, t') = T^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t'} dt_2 G_{11}^R(t - t_1)G_{22}^{0<}(t_1 - t_2)G_{11}^A(t_2 - t') \quad (5.23)$$

Функция Грина $G_{22}^{0<}$ может быть найдена из уравнений для функции $G_{11}^<$ с заменой индекса 1 на индекс 2. Тогда, выражение для функции Грина $G_{22}^{0<}$ имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{22}^{0<}(t, t') &= in_2(0) \cdot e^{-\gamma(t+t')} \cdot e^{-i\varepsilon_2(t-t')} + \frac{i}{\pi} \int d\omega \cdot f(\omega) \cdot \\ &\cdot \frac{\gamma}{(\omega - \varepsilon_2)^2 + \gamma^2} \cdot [e^{-i\omega(t-t')} + e^{-i\varepsilon_2(t-t') - \gamma(t+t')} - \\ &\quad - e^{-i\varepsilon_2 t - \gamma t + i\omega t'} - e^{i\varepsilon_2 t' - \gamma t' - i\omega t'}] \end{aligned} \quad (5.24)$$

Выражение (5.24) для функции Грина $G_{22}^{0<}$ содержит экспоненциально затухающее слагаемое, осциллирующее слагаемое и слагаемое, которое определяет стационарное решение. Далее для простоты рассмотрим случай, когда выполнено условие $\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_F}{\gamma} \gg 1$. Это условие означает, что стационарные числа заполнения во второй квантовой точке в отсутствие взаимодействия между точками имеют порядок величины $\frac{\gamma}{\varepsilon_2 - \varepsilon_F} \ll 1$. Таким образом, можно пренебречь соответствующими членами в выражении (5.24) для функции Грина $G_{22}^{0<}$.

Мы рассматриваем начальные условия, когда весь заряд в системе локализован в первой квантовой точке. Функция Грина $G_{22}^{0<}(0, 0)$ в начальный момент времени принимает значение близкое к нулю ($G_{22}^{0<}(0, 0) \simeq 0$), и функция Грина $G_{11}^{<}(t, t')$ определяется только однородным решением дифференциального уравнения. Однородное решение дифференциального уравнения имеет вид:

$$G_{11}^{<}(t, t') = f_1(t')e^{-iE_1t} + f_2(t')e^{-iE_2t} \quad (5.25)$$

Поскольку для функции $G^{<}(t, t')$ выполнены требования симметрии, то верно следующее соотношение:

$$(G_{11}^{<}(t, t'))^* = -G_{11}^{<}(t', t) \quad (5.26)$$

Тогда

$$G_{11}^{<}(t', t) = iAe^{-iE_1t+iE_1^*t'} + iBe^{-iE_1t+iE_2^*t'} + iB^*e^{-iE_2t+iE_1^*t'} + iCe^{-iE_2t+iE_2^*t'} \quad (5.27)$$

Решение (5.27) должно удовлетворять однородному интегро-дифференциальному уравнению (5.22) (без правой части). После подстановки выражения (5.25) в уравнение (5.22) можно получить следующее соотношение между функциями $f_1(t')$ и $f_2(t')$:

$$\frac{f_1(t')}{f_2(t')} = -\frac{\varepsilon_2 - E_1 - i\gamma}{\varepsilon_2 - E_2 - i\gamma} \quad (5.28)$$

Учитывая начальные условия

$$G_{11}^{<}(0, 0) = in_1^0, \quad (5.29)$$

получим зависимость чисел заполнения $n_1(t)$ от времени в первой квантовой точке:

$$n_1(t) = n_1^0 \cdot (A'e^{-i(E_1-E_1^*)t} + 2Re(B'e^{-i(E_1-E_2^*)t}) + C'e^{-i(E_2-E_2^*)t}) \quad (5.30)$$

где коэффициенты A' , B' и C' имеют вид:

$$\begin{aligned} A' &= \frac{|E_2 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2}; C' = \frac{|E_1 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2} \\ B' &= -\frac{(E_2 - \varepsilon_1)(E_1^* - \varepsilon_1)}{|E_2 - E_1|^2} \end{aligned} \quad (5.31)$$

Временная эволюция чисел заполнения во второй квантовой точке определяется функцией Грина $G_{22}^<(t, t')$ с начальным условием $G_{22}^<(0, 0) = 0$. В соответствии с начальными условиями $n_2(0) = 0$, $n_1(0) = n_0$, эволюция чисел заполнения во второй квантовой точке $n_2(t)$ определяется неоднородной частью решения дифференциального уравнения. Зависимость электронных чисел заполнения от времени $n_2(t)$ во второй квантовой точке имеет вид:

$$n_2(t) = (De^{-i(E_1 - E_1^*)t} + 2\text{Re}(Ee^{-i(E_1 - E_2^*)t}) + Fe^{-i(E_2 - E_2^*)t}) \quad (5.32)$$

где использованы следующие выражения для коэффициентов D , E и F :

$$D = F = \frac{T^2}{|E_2 - E_1|^2}; \quad E = -\frac{T^2}{|E_2 - E_1|^2} \quad (5.33)$$

Выражения (5.30) и (5.32) описывают существование в системе трех каналов (мод) релаксации, характеризующихся различными временными масштабами. Первому и второму каналам соответствуют скорости релаксации ($|E_1 - E_1^*|$) и ($|E_2 - E_2^*|$). Еще один характерный временной масштаб в системе определяется выражением ($|E_1 - E_2^*|$). Этот временной масштаб приводит к формированию зарядовых осцилляций в обеих квантовых точках, когда выполнено следующее соотношение между параметрами системы T и γ : $T/\gamma > 1/2$.

Проанализируем подробно различные релаксационные режимы, возникающие в системе, в зависимости от соотношений между параметрами. Рассмотрим следующие предельные случаи:

В случае резонансного туннелирования между уровнями энергии в квантовых точках $\varepsilon_1 \simeq \varepsilon_2$:

1) Выполнение условия $2T < \gamma$ приводит к отсутствию осцилляций зарядовой плотности в каждой из квантовых точек при релаксации заряда. В этом случае выполнены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} E_1 - E_1^* &= -i\gamma(1 - \sqrt{1 - (4T^2)/\gamma^2}) \\ E_2 - E_2^* &= -i\gamma(1 + \sqrt{1 - (4T^2)/\gamma^2}) \\ E_1 - E_2^* &= -i\gamma \end{aligned} \quad (5.34)$$

2) В случае, когда выполнено условие $2T \ll \gamma$, временная эволюция зарядовой плотности в первой квантовой точке описывается выражением:

$$n_1(t) = n_1^0 \left[\left(1 + \frac{2T^2}{\gamma^2}\right) e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t} - \frac{2T^2}{\gamma^2} e^{-\gamma t} \right] \quad (5.35)$$

Основная часть заряда затухает со скоростью

$$\gamma_{res} = 2T^2/\gamma \quad (5.36)$$

3) В системе двух связанных квантовых точек существует особый режим релаксации заряда, когда выполнено условие $2T = \gamma$. В этом случае заряд в каждой из квантовых точек релаксирует не по экспоненциальному закону. Временная эволюция чисел заполнения точек определяется выражениями:

$$\begin{aligned} n_1(t) &= n_1^0(1 + \gamma t)e^{-\gamma t} \\ n_2(t) &= \gamma^2 T^2 e^{-\gamma t} \end{aligned} \quad (5.37)$$

4) При выполнении соотношения $2T > \gamma$ релаксация зарядовой плотности в системе сопровождается формированием осцилляций в каждой из квантовых точек с характерной частотой $\Omega = \sqrt{4T^2 - \gamma^2}$

$$n_1(t) = n_1^0 e^{-\gamma t} \frac{1}{2} [1 + \cos(2Tt)] \quad (2T \gg \gamma_2) \quad (5.38)$$

Рассмотрим теперь случай нерезонансного туннелирования между квантовыми точками. Вдали от резонанса, когда выполнено соотношение

между параметрами системы $|\varepsilon_1 - \varepsilon_2| \gg \gamma, T$, релаксация зарядовой плотности в первой квантовой точке определяется выражением:

$$n_1(t) = n_1^0 \left[\left(1 - \frac{2T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \right) e^{-\frac{2T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \gamma t} + \frac{2T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \cos[(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)t] e^{-\gamma t} \right] \quad (5.39)$$

Скорости релаксации γ_{res} и γ_{nonres} в случаях резонансного и нерезонансного туннелирования соответственно связаны между собой следующими соотношениями:

$$\gamma_{res} = \frac{2T^2}{\gamma} \quad \gamma_{nonres} = \gamma_{res} \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \quad (5.40)$$

В нерезонансном случае скорость релаксации основной части заряда сильно уменьшается по сравнению с резонансным случаем. Различие скоростей релаксации в резонансном и нерезонансном случаях может быть использовано для контролируемого изменения локальной зарядовой плотности в системе связанных квантовых точек при изменении во времени положения уровня энергии одного из локализованных состояний, например, за счет периодического воздействия внешним полем. Кроме того, в таких системах возникает нестационарный туннельный ток при нулевом напряжении на контакте. Таким образом, на основе системы связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, может быть создан электронный зарядовый насос. Модель такого насоса, оценка его характеристик, а также возможность применения в нанoeлектронике рассмотрены в следующем параграфе [286].

§ 5.3. Модель неадиабатического электронного зарядового насоса на основе связанных квантовых точек

В настоящее время электронные насосы на базе наноструктур являются объектом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований. Такие исследования являются актуальными для создания высокочастотных усилителей и детекторов, функционирующих на эффекте резонансного туннелирования, аналоговых преобразователей, микросенсоров и излучателей, генерирующих сверхкороткие импульсы. Основной проблемой в этой области является получение высокоточного высокоскоростного

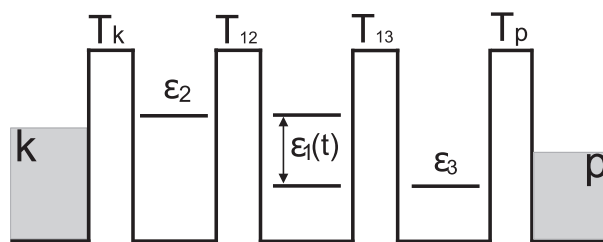


Рис. 5.3. Схематическое изображение уровней энергии в системе трех связанных квантовых точек. Положение уровня энергии в средней квантовой точке зависит от времени.

электронного транспорта. Еще одним важным применением электронных насосов является создание стандарта тока и частоты, функционирующего при характерных значениях тока в наноамперы с рабочими частотами, лежащими в гигагерцовом диапазоне. В этой области хорошо исследованным вопросом является адиабатический электронный насос [194, 199]. Основным объектом исследований являются электронные насосы, которые созданы на основе структур с периодически изменяющимися во времени потенциальными барьерами. Исследуемые системы функционируют в режиме насоса при приложении осциллирующего сигнала к затвору или при облучении полупроводниковых структур монохроматическими или импульсными микроволнами [193, 201].

В процессе исследования таких структур, быстро стало понятно, что важную роль в процессах электронного транспорта играет эффект кулоновской блокады [206, 207]. Основываясь на использовании эффекта кулоновской блокады, были реализованы неадиабатические электронные насосы в гибридных структурах металл-сверхпроводник [208, 209]. В таких системах удалось получить квантованный ток, пропорциональный частоте на затворе, который возникал в системе при напряжениях отличных от нуля [210].

В данном разделе предложен новый тип электронного насоса на базе трех связанных квантовых точек, принцип действия которого основан на протекании нестационарного туннельного тока [286]. Средний туннельный ток возникает в такой системе при нулевом напряжении на контакте при комнатных температурах из-за различия скоростей релаксации при резонансном и нерезонансном туннелировании между квантовыми точками. На основе предложенного типа электронного насоса может быть создан новый класс полупроводниковых приборов, принцип работы которых основан на протекании нестационарного туннельного тока.

Исследуем процессы протекания нестационарного туннельного тока в системе трех связанных квантовых точек (рис. 5.3). Левая и правая квантовые точки имеют одноэлектронные уровни энергии ε_2 и ε_3 соответственно. Положение уровня энергии в средней квантовой точке ε_1 зависит от времени и может изменяться при приложении внешнего напряжения к затвору. Квантовые точки с уровнями энергии ε_2 и ε_3 взаимодействуют с состояниями непрерывного спектра - резервуарами. Гамильтониан исследуемой системы имеет вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i=1,\sigma}^3 \varepsilon_i c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + T_{12}(c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \\ & + T_{13}(c_{1\sigma}^+ c_{3\sigma} + c_{3\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \sum_{k,\sigma} T_k (c_{k\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{k\sigma}) + \sum_{p,\sigma} T_p (c_{p\sigma}^+ c_{3\sigma} + c_{3\sigma}^+ c_{p\sigma}) \end{aligned} \quad (5.41)$$

где T_{12} , T_{13} - амплитуды туннельных переходов между квантовыми точками; T_k и T_p - амплитуды туннельных переходов между крайними квантовыми точками и состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта (k) и (p) соответственно. Операторы $c_{i\sigma}^+/c_{i\sigma}$ и $c_{k(p)\sigma}^+/c_{k(p)\sigma}$ описывают рождение/уничтожение электронов со спином σ на уровнях энергии квантовых точек и в состояниях непрерывного спектра в берегах туннельного контакта соответственно.

Рассмотрим случай, когда выполнены следующие соотношения между уровнями энергии в системе: $\varepsilon_2 > \varepsilon_F$ и $\varepsilon_3 < \varepsilon_F$. Эти условия означают, что уровень энергии ε_2 остается незаполненным, а уровень ε_3 - всегда заполнен. Эффект электронного насоса возникает в случае, когда напряжение на затворе изменяет положение уровня энергии ε_1 относительно положения уровней ε_2 и ε_3 . Для анализа возникновения нестационарного туннельного тока будем использовать диаграммную технику Келдыша для неравновесных процессов.

Рассмотрим временную эволюцию заряда в случае, когда весь заряд в системе локализован в средней квантовой точке и имеет величину $n_1(0)$. Вычислим запаздывающие функции Грина системы. В отсутствие туннелирования между квантовыми точками функции Грина $G_{11}^R(t-t')$, $G_{22}^R(t-t')$ и $G_{33}^R(t-t')$ определяются выражениями:

$$G_{11}^R(t-t') = -i\Theta(t-t')e^{-i\varepsilon_1(t-t')}$$

$$\begin{aligned}
G_{22}^R(t-t') &= -i\Theta(t-t')e^{-i\varepsilon_2(t-t')-\gamma_2(t-t')} \\
G_{33}^R(t-t') &= -i\Theta(t-t')e^{-i\varepsilon_3(t-t')-\gamma_3(t-t')}
\end{aligned} \tag{5.42}$$

где $\gamma_2 = \pi\nu_k^0 T_k^2$ и $\gamma_3 = \pi\nu_p^0 T_p^2$ скорости релаксации электронов из крайних квантовых точек в состояния непрерывного спектра в берегах туннельного контакта. Точное выражение для запаздывающей электронной функции Грина G_{11}^R в квантовой точке с уровнем энергии ε_1 (первой квантовой точке) можно вычислить с помощью интегрального уравнения:

$$G_{11}^R = G_{11}^{0R} + G_{11}^{0R} T_{12}^2 G_{22}^R G_{11}^R + G_{11}^{0R} T_{13}^2 G_{33}^R G_{11}^R \tag{5.43}$$

Действуя поочередно на уравнение (5.43) обратными операторами G_{11}^{0R-1} , G_{22}^{R-1} , G_{33}^{R-1} , получим дифференциальное уравнение, эквивалентное исходному интегральному уравнению (кроме момента времени, когда выполнено условие $t = t'$):

$$\begin{aligned}
&[(i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_3 + i\gamma_3)((i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_2 + i\gamma_2)(i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_1) - T_{12}^2 \cdot \\
&\cdot (i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_3 + i\gamma_3) - T_{13}^2 (i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_2 + i\gamma_2)] G_{11}^R(t, t') = 0
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Следовательно, запаздывающая функция Грина, которая определяет изменение спектра в системе, вызванное наличием межчастичного взаимодействия, может быть представлена в виде:

$$G_{11}^R(t, t') = i\Theta(t-t')(A_1 e^{-iE_1(t-t')} + A_2 e^{-iE_2(t-t')} + A_3 e^{-iE_3(t-t')}) \tag{5.45}$$

Собственные частоты $E_{1,2,3}$ можно определить из уравнения (5.44):

$$\begin{aligned}
&(E - \varepsilon_1) \cdot (E - \varepsilon_2 + i\gamma_2) \cdot (E - \varepsilon_3 + i\gamma_3) - \\
&- T_{12}^2 \cdot (E - \varepsilon_3 + i\gamma_3) - T_{13}^2 \cdot (E - \varepsilon_2 + i\gamma_2) = 0
\end{aligned} \tag{5.46}$$

где коэффициенты A_i можно вычислить с помощью интегрального уравнения для функции Грина G_{11}^R :

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{E_1(E_1 + E_3 - \tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_3) - E_1 E_3 + \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_3}{(E_1 - E_2)(E_1 - E_3)} \\
A_2 &= \frac{E_2(E_2 + E_3 - \tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_3) - E_2 E_3 + \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_3}{(E_2 - E_3)(E_2 - E_1)} \\
A_3 &= \frac{E_3(E_2 + E_3 - \tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_3) - E_2 E_3 + \tilde{\varepsilon}_2 \tilde{\varepsilon}_3}{(E_3 - E_1)(E_3 - E_2)}
\end{aligned} \tag{5.47}$$

В выражениях для коэффициентов A_i введено обозначение $\tilde{\varepsilon}_i = \varepsilon_i - i\gamma_i$.

Далее для простоты будем рассматривать случай, когда величины амплитуд туннельных переходов между крайними квантовыми точками и центральной квантовой точкой равны $T_{12} = T_{13} = T$. Если выполнены следующие условия на взаимное расположение уровней энергии $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ и $\varepsilon_1 - \varepsilon_3 \gg T, \gamma$, то коэффициенты A_i можно записать в более простом и компактном виде:

$$\begin{aligned} A_1 &= A_1^0 \left(1 + \frac{E_3 - \tilde{\varepsilon}_3}{E_1 - E_3}\right) = A_1^0 \left(1 + \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2}\right) \\ A_2 &= A_2^0 \left(1 + \frac{E_3 - \tilde{\varepsilon}_3}{E_1 - E_3}\right) = A_2^0 \left(1 + \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2}\right) \\ A_3 &= -\frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \end{aligned} \quad (5.48)$$

где использованы следующие обозначения: $A_1^0 = \frac{E_1 - \tilde{\varepsilon}_2}{E_1 - E_2}$ и $A_2^0 = -\frac{E_2 - \tilde{\varepsilon}_2}{E_1 - E_2}$.

Если от исследуемой системы отделить квантовую точку с уровнем энергии ε_3 (правую квантовую точку), то коэффициенты A_1^0 и A_2^0 дадут точное решение для системы двух связанных квантовых точек с энергиями ε_1 и ε_2 .

Временная эволюция электронной плотности в средней квантовой точке определяется келдышевской функцией Грина $G_{11}^<(t, t)$:

$$G_{11}^<(t, t) = in_1(t) \quad (5.49)$$

Уравнения для функций Грина $G_{ii}^<$ имеют вид:

$$\begin{aligned} (G_{11}^{0-1} - T_{12}^2 G_{22}^R - T_{13}^2 G_{33}^R) G_{11}^< &= T_{12}^2 G_{22}^< G_{11}^A + T_{13}^2 G_{33}^< G_{11}^A \\ (G_{22}^{0-1} - T_{12}^2 G_{11}^R - \sum_k T_k^2 G_{kk}^R) G_{22}^< &= T_{12}^2 G_{11}^< G_{22}^A + \sum_k T_k^2 G_{kk}^< G_{22}^A \\ (G_{33}^{0-1} - T_{13}^2 G_{11}^R - \sum_p T_p^2 G_{pp}^R) G_{33}^< &= T_{13}^2 G_{11}^< G_{33}^A + \sum_p T_p^2 G_{pp}^< G_{33}^A \end{aligned} \quad (5.50)$$

Если начальный заряд локализован в средней квантовой точке, то для функций Грина в начальный момент времени выполнены следующие соотношения $G_{22}^<(0, 0) = in_F(\varepsilon_2) \simeq 0$, $G_{33}^<(0, 0) = in_F(\varepsilon_3) \simeq 1$ и

$G_{11}^{\leq}(0, 0) = n_1(0)$. Тогда выражение для функции Грина $G_{11}^{\leq}(t, t')$ определяется суммой однородного и неоднородного решений дифференциального уравнения. Неоднородное решение уравнения имеет вид:

$$G_{11}^{\leq}(t, t') = iT_{13}^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t'} dt_2 G_{11}^R(t - t_1) n_F(\varepsilon_3) e^{-i\tilde{\varepsilon}_3(t_1 - t_2)} G_{11}^A(t_2 - t') \quad (5.51)$$

Однородное решение дифференциального уравнения может быть записано в виде:

$$-iG_{11}^{\leq}(t, t') = f_1(t')e^{-iE_1 t} + f_2(t')e^{-iE_2 t} + f_3(t')e^{-iE_3 t} \quad (5.52)$$

Функция Грина $G^{\leq}(t, t')$ удовлетворяет условию симметрии:

$$[G_{11}^{\leq}(t, t')]^* = -G_{11}^{\leq}(t', t), \quad (5.53)$$

тогда для коэффициентов $f_i(t')$ выполнены следующие соотношения:

$$\begin{aligned} f_1(t') &= Ae^{iE_1^* t'} + Be^{iE_2^* t'} + Xe^{iE_3^* t'} \\ f_2(t') &= Ce^{iE_3^* t'} + B^* e^{iE_1^* t'} + De^{iE_3^* t'} \\ f_3(t') &= X^* e^{iE_1^* t'} + D^* e^{iE_2^* t'} + Ze^{iE_3^* t'} \end{aligned} \quad (5.54)$$

Поскольку решение должно удовлетворять однородному интегро-дифференциальному уравнению, то все коэффициенты можно определить в явном виде. После проведения алгебраических преобразований можно получить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} f_2(t') &= F_{21} f_1(t') \\ f_3(t') &= F_{31} f_1(t') \end{aligned} \quad (5.55)$$

где коэффициенты F_{21}, F_{31} можно записать в явном виде:

$$\begin{aligned} F_{21} &= - [(E_2 - \tilde{\varepsilon}_2)(E_2 - \tilde{\varepsilon}_3)((E_1 - \tilde{\varepsilon}_2)(E_3 - \tilde{\varepsilon}_2) + \\ &+ (E_1 - \tilde{\varepsilon}_3)(\tilde{\varepsilon}_2 - E_3))] \cdot \\ &\cdot [(E_1 - \tilde{\varepsilon}_2)(E_1 - \tilde{\varepsilon}_3)((E_3 - \tilde{\varepsilon}_3)(E_2 - \tilde{\varepsilon}_2) + \\ &+ (\tilde{\varepsilon}_2 - E_3)(E_2 - \tilde{\varepsilon}_2))]^{-1} \\ F_{31} &= \frac{(E_3 - \tilde{\varepsilon}_2)(E_2 - \tilde{\varepsilon}_2 + (E_1 - \tilde{\varepsilon}_2)F_{21})}{(E_2 - \tilde{\varepsilon}_2)(E_1 - \tilde{\varepsilon}_2)} \end{aligned} \quad (5.56)$$

Тогда определим все коэффициенты в выражениях (5.54) :

$$\begin{aligned}
A &= \frac{n_1(0)}{1 + |F_{21} + F_{31}|^2 + 2\text{Re}F_{21} + 2\text{Re}F_{31}} \\
B &= F_{21}^* \cdot A; \quad C = |F_{21}|^2 \cdot A \\
D &= F_{31}^* F_{21} \cdot A; \quad Z = |F_{31}|^2 \cdot A; \quad X = F_{31}^* \cdot A
\end{aligned} \tag{5.57}$$

Временная эволюция чисел заполнения в средней квантовой точке $n_1(t)$ определяется выражением:

$$\begin{aligned}
n_1(t) &= n_1^0 \cdot (Ae^{-i(E_1 - E_1^*)t} + Ce^{-i(E_2 - E_2^*)t} + \\
&\quad + Ze^{-i(E_3 - E_3^*)t}) + 2\text{Re}(Be^{-i(E_1 - E_2^*)t}) + \\
&\quad + 2\text{Re}(Xe^{-i(E_1 - E_3^*)t}) + 2\text{Re}(De^{-i(E_2 - E_3^*)t})
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Таким образом, в рассматриваемой системе существует шесть временных масштабов (мод), которые определены выражением (5.58). Три масштаба можно рассматривать как каналы релаксации со скоростями $2\text{Im}E_1$, $2\text{Im}E_2$ и $2\text{Im}E_3$. Три других временных масштаба определяются выражениями $\text{Re}(E_1 - E_2^*)$, $\text{Re}(E_1 - E_3^*)$ и $\text{Re}(E_2 - E_3^*)$ и отвечают за формирование осцилляций при эволюции чисел заполнения.

Если пренебречь туннелированием между центральной квантовой точкой и правой квантовой точкой, то для системы из двух связанных квантовых точек ($T_{13} = 0$) появляется только три временных масштаба, и из уравнений (5.56), (5.57), (5.58) получим соотношение для функций $f_1(t')$ и $f_2(t')$:

$$\frac{f_1(t')}{f_2(t')} = -\frac{\varepsilon_2 - E_1 - i\gamma}{\varepsilon_2 - E_2 - i\gamma} \tag{5.59}$$

Выражение для временной эволюции чисел заполнения $n_1(t)$ в квантовой точке с уровнем энергии ε_1 можно записать в виде:

$$n_1(t) = n_1^0 \cdot [Ae^{-i(E_1 - E_1^*)t} + 2\text{Re}(Be^{-i(E_1 - E_2^*)t}) + Ce^{-i(E_2 - E_2^*)t}] \tag{5.60}$$

где коэффициенты A , B и C определяются выражениями:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{|E_2 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2} \\
C &= \frac{|E_1 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2} \\
B &= -\frac{(E_2 - \varepsilon_1)(E_1^* - \varepsilon_1)}{|E_2 - E_1|^2}
\end{aligned} \tag{5.61}$$

а коэффициенты X , Z и D в точности равны нулю.

В этом случае в системе существует два характерных временных масштаба γ_{res} и γ_{nonres} , которые описывают релаксацию заряда через промежуточную квантовую точку в состоянии непрерывного спектра в случаях резонансного и нерезонансного туннелирования:

$$\gamma_{res} = \frac{2T^2}{\gamma} \quad \gamma_{nonres} = \gamma_{res} \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2} \tag{5.62}$$

Поскольку мы рассматриваем ситуацию, когда выполнены соотношения $\varepsilon_1 - \varepsilon_3 \gg T$ и $\varepsilon_1 - \varepsilon_3 \gg \gamma$, то скорость резонансной релаксации значительно превосходит скорость релаксации через нерезонансный канал $\gamma_{res} \gg \gamma_{nonres}$, и в системе существует малый параметр $\gamma_{nonres}/\gamma_{res}$. Наличие малого параметра позволяет выписать приближенные выражения для системы трех связанных квантовых точек, которые в случае резонансного туннелирования между средней и левой квантовыми точками $\varepsilon_1 \simeq \varepsilon_2$ оказываются справедливыми в первом порядке теории возмущений по параметру $\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2}$:

$$\begin{aligned}
E_1 - E_1^* &= -i\gamma_{res} \left[1 + \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right] \\
E_2 - E_2^* &= -2i\gamma \left[1 - \frac{T^2}{\gamma^2} + \frac{T^2}{\gamma^2} \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right] \\
E_3 - E_3^* &= 2i\gamma \left[1 - \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right] \\
E_2 - E_3^* &= \varepsilon_1 - \varepsilon_3 - 2i\gamma \left[\left(1 + \frac{T^2}{2\gamma^2} - \frac{T^2}{2(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right) \right] \\
E_1 - E_3^* &= \varepsilon_1 - \varepsilon_3 - i\gamma_{res} \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} - i\gamma \left[1 - \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right]
\end{aligned} \tag{5.63}$$

$$E_1 - E_2^* = i\gamma + \frac{2T^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3} - i\frac{T^2}{\gamma} \left[\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} - \frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right]$$

При выполнении условий $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\varepsilon_1 - \varepsilon_3 \gg T$ и $\varepsilon_1 - \varepsilon_3 \gg \gamma$, точные выражения (5.56) принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} F_{21} &\simeq -\frac{T^2}{\gamma^2} \left[1 + \frac{\gamma}{\varepsilon_1 - \varepsilon_3} + \frac{T^2}{\gamma^2} - \frac{T^2}{\gamma(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)} \right] \\ F_{31} &\simeq \frac{T^2}{\gamma^2} \left[\frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} + i\frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2} \right] \end{aligned} \quad (5.64)$$

Таким образом, коэффициенты D , Z и X , которые отвечают за "обратный" ток в правый берег туннельного контакта принимают значения намного меньшие, чем значения коэффициентов A , B и C , которые соответствуют "прямому" току в левый берег туннельного контакта, из-за появления малого параметра $\frac{T^2}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2}$. Поэтому, для простоты опустим слагаемые, содержащие коэффициенты D , Z и X в выражении (5.58), которое определяет временную эволюцию заряда, локализованного в средней квантовой точке.

Накачка электронов происходит в том случае, если уровень энергии в средней квантовой точке $\varepsilon_1(t)$ является функцией времени и его положение на шкале энергий изменяется периодически (рис. 5.3). Рассмотрим случай слабо связанных квантовых точек, когда выполнено условие $T \ll \gamma$. Для вычисления туннельного тока будем рассматривать случай периодического переключения положения уровня энергии ε_1 в средней квантовой точке внешним затвором.

Пусть между уровнями энергии в средней и левой квантовых точках выполнено соотношение $\varepsilon_1(t) = \varepsilon_2$ в интервале времен $0 < t < t_0$. Выполнение этого условия означает резонансное туннелирование между уровнями энергии ε_1 и ε_2 квантовых точек.

Пусть в интервале времен $t_0 < t < 2t_0$ происходит резонансное туннелирование между уровнями энергии средней ε_1 и правой ε_3 квантовых точек, тогда выполнено соотношение $\varepsilon_1(t) = \varepsilon_3$.

Временная эволюция локальной электронной плотности в средней квантовой точке $n_1(t)$ определяется выражением (5.58) и показана на рисунке 5.4.

В интервале $0 < t < t_0$, временная эволюция чисел заполнения в средней квантовой точке описывается выражением:

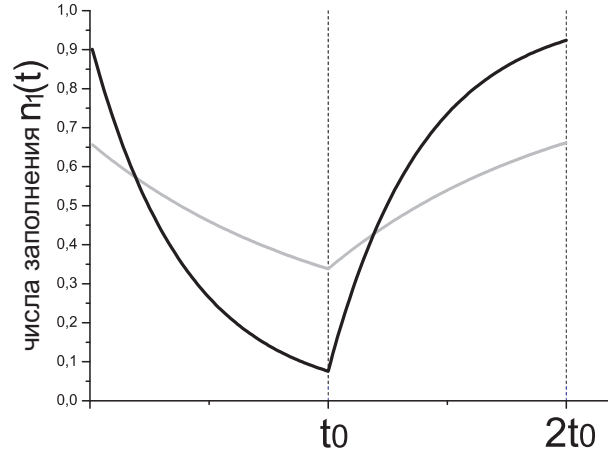


Рис. 5.4. Временная эволюция локальной электронной плотности $n_1(t)$ в центральной квантовой точке в системе трех связанных квантовых точек в случае, когда положение уровня энергии в средней квантовой точке зависит от времени. Кривая черного цвета соответствует случаю, когда частота переключения положения уровня энергии ε_1 меньше скоростей релаксации. Кривая серого цвета соответствует случаю, когда частота переключения положения уровня энергии ε_1 больше скоростей релаксации.

$$n_1(t) = n_1^0 \left[\left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} \right) e^{-\gamma_{res}t} - \frac{\gamma_{res}}{\gamma} e^{-\gamma t} \right] \quad (5.65)$$

а в интервале $t_0 < t < 2t_0$ - выражением:

$$n_1(t) = n_1^0 \left[\left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} \right) e^{-\gamma_{res}(t-t_0)} - \frac{\gamma_{res}}{\gamma} (e^{-\gamma(t-t_0)}) \right] + \\ + \left[1 - \left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} \right) e^{-\gamma_{res}(t-t_0)} + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} e^{-\gamma(t-t_0)} \right] \quad (5.66)$$

За время первого полупериода ($0 < t < t_0$) амплитуда локализованного заряда уменьшается из-за туннелирования в состояния непрерывного спектра через левую квантовую точку (точка с уровнем энергии ε_2), а за время второго полупериода ($t_0 < t < 2t_0$) средняя квантовая точка (точка с уровнем энергии ε_1) заполняется в результате туннелирования из состояний непрерывного спектра через правую квантовую точку (точка с уровнем энергии ε_3). Учитывая условия периодичности $n_1(2t_0) = n_1^0$, получим выражение для постоянной n_1^0 :

$$n_1^0 = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} \right) e^{-\gamma_{res}t_0} - \frac{\gamma_{res}}{\gamma} e^{-\gamma t_0}} \quad (5.67)$$

Результаты расчетов временной эволюции чисел заполнения в средней квантовой точке $n_1(t)$ представлены на рисунке 5.4. Случай, когда

частота изменения положения уровня энергии в средней квантовой точке $\Omega \equiv 1/2t_0$ превосходит скорости релаксации γ_{res}, γ изображен кривой серого цвета. Кривая черного цвета соответствует случаю, когда частота изменения положения уровня энергии в средней квантовой точке Ω меньше скоростей релаксации γ_{res}, γ . С ростом частоты амплитуда чисел заполнения $n_1(t)$ стремится к $1/2$ и почти не зависит от времени для высоких частот переключения затвора.

Для низких частот при выполнении условия $\gamma_{res}t_0 \gg 1$ значение постоянной n_1^0 практически равно 1. Уровень энергии ε_1 заполняется практически полностью за один цикл накачки (для рассматриваемого случая, когда уровень энергии ε_2 расположен значительно выше, а уровень ε_3 значительно ниже уровня Ферми).

Нестационарный туннельный ток возникает в рассматриваемой системе при нулевом напряжении на туннельном контакте. Величину туннельного тока можно вычислить для любого полупериода, используя уравнение:

$$e \frac{\partial}{\partial t} n_1(t) = I(t) \quad (5.68)$$

Для первого полупериода $0 < t < t_0$ выражение для туннельного тока имеет вид:

$$I(t) = en_1^0 \gamma_{res} \left[\left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma}\right) e^{-\gamma_{res}t} - e^{-\gamma t} \right] \quad (5.69)$$

Среднее значение туннельного тока определяется выражением:

$$\begin{aligned} \langle I \rangle &= e \frac{1}{2t_0} \int_0^{t_0} I(t) dt = e \frac{1}{2t_0} n_1^0 \cdot \\ &\cdot \left[1 - \left(1 + \frac{\gamma_{res}}{\gamma}\right) e^{-\gamma_{res}t_0} + \frac{\gamma_{res}}{\gamma} e^{-\gamma t_0} \right] \end{aligned} \quad (5.70)$$

Выражение для среднего значения туннельного тока имеет простой вид $\langle I \rangle = e\Omega$, если выполнено условие $\Omega \equiv 1/2t_0 \ll \gamma_{res}$, поскольку в рассматриваемом диапазоне частот изменения напряжения на затворе $n_1^0 = 1$. В этом режиме связанные квантовые точки можно использовать как стандарт тока: величина туннельного тока прямо пропорциональна частоте изменения напряжения на затворе. Система функционирует в режиме стандарта туннельного тока с экспоненциальной точностью, которая

определяется вторым и третьим слагаемыми в квадратных скобках в выражении (5.70). Необходимо заметить, что даже в случае, когда расстройка между уровнями энергии в крайних ямах сопоставима по величине со скоростями релаксации $|\varepsilon_2 - \varepsilon_3| \simeq \gamma \simeq T$, эффект насоса не исчезает. Величина туннельного тока остается пропорциональной частоте, но уменьшается по сравнению со значением, полученным для идеальных условий функционирования электронного насоса $\langle I \rangle = e\Omega$.

Для случая, когда напряжение на затворе изменяется с высокой частотой $\gamma \gg \Omega \equiv 1/2t_0 \gg \gamma_{res}$, среднее значение туннельного тока не зависит от частоты изменения напряжения на затворе и имеет величину: $\langle I \rangle = e\gamma_{res}/4$ ($\gamma_{res} = \frac{2T^2}{\gamma}$). При дальнейшем увеличении частоты ($\Omega \gg \gamma \gg \gamma_{res}$) среднее значение туннельного тока уменьшается $\langle I \rangle = e\gamma_{res}^2/4\gamma$.

Таким образом, среднее значение нестационарного туннельного тока в рассматриваемой системе демонстрирует немонотонное поведение в зависимости от частоты изменения напряжения на затворе с максимум на частоте $\Omega \simeq \gamma_{res}$ (рис. 5.5). Этот эффект может быть использован для стабилизации частоты в устройствах, применяемых в современной нанoeлектронике.

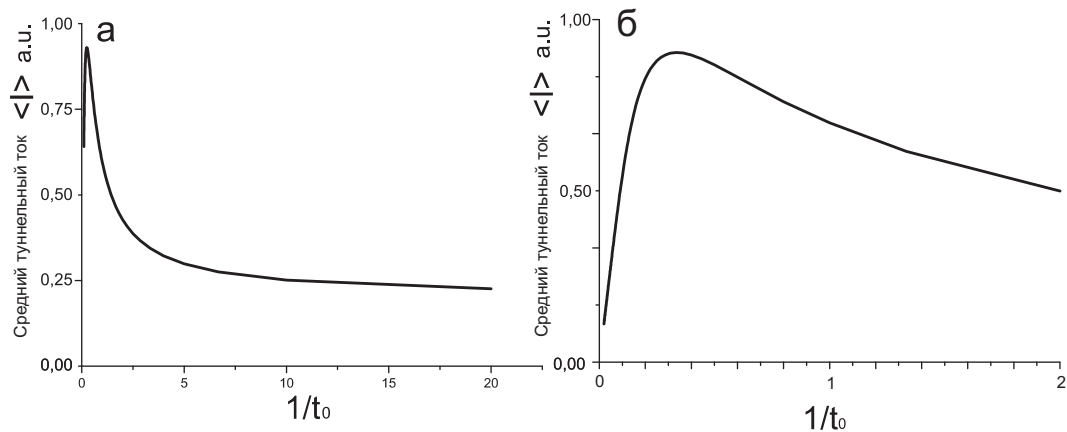


Рис. 5.5. Зависимость среднего туннельного тока через систему трех связанных квантовых точек от частоты (частота изменения положения уровня энергии в средней квантовой точке $\Omega = 1/2t_0$). На рисунках представлены разные масштабы частоты.

Параметры устройства на основе связанных квантовых точек зависят от размеров квантовых точек, расстояния между точками, амплитуд туннельных переходов, положений уровней энергии. Оценка типичных параметров туннельной системы позволяет определить характерные значения частот и токов, которые можно достичь в таких устройствах:

$$T \simeq 1 \text{ meV}, \quad \gamma \simeq 1 \div 10 \text{ meV} \Rightarrow \\ \gamma_{res} = 2T^2/\gamma \simeq 0.1 \div 1 \text{ meV} \simeq 10^{10} \div 10^{11} \text{ 1/sec}$$

где величины параметров T и γ определяются ширинами и высотами туннельных барьеров. Для того, чтобы получить значения, использованные при расчетах, необходимо создавать электронный насос на базе квантовых точек с типичным размером порядка десяти нанометров [287, 288]. Для точек такого размера значения энергии уровней размерного квантования не меньше, чем туннельные ширины уровней. Устройства такого типа могут работать на гигагерцовых и субгигагерцовых частотах и достигать значений токов порядка наноампер и субнаноампер ($1 \text{ nA} \simeq 6 \cdot 10^9 \text{ e/sec}$).

Различие между амплитудами туннелирования в резонансном и нерезонансном случаях можно использовать для создания инверсной заселенности квантового эмиттера, созданного на основе связанных квантовых точек. Схема такого устройства представлена на рис. 5.6.

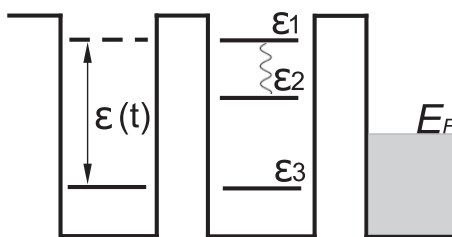


Рис. 5.6. Схематическое изображение двух связанных квантовых точек, которые могут быть использованы для создания нестационарной инверсной заселенности уровней энергии.

В системе двух связанных квантовых точек положение уровня энергии ϵ можно изменять, прикладывая напряжение к затвору. Если при этом в квантовой точке существует третий нерезонансный уровень энергии, который расположен между верхним и нижним уровнями энергии, то перекачка заряда с изначально заполненного уровня ϵ_3 на наивысший уровень ϵ_1 создает инверсную заселенность состояний с энергиями ϵ_2 и ϵ_1 . Этот принцип может быть применен для создания квантового генератора нанометровых размеров.

§ 5.4. Выводы

Исследованы процессы релаксации заряда в квантовых точках большого размера с мелкими уровнями энергии, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра. В таких системах при исследовании основ-

ных закономерностей релаксации заряда можно не учитывать кулоновское взаимодействие локализованных электронов.

1. Показано, что релаксация заряда в квантовой точке, связанной с резервуаром, происходит по закону, отличающемуся от экспоненциального, при учете функции распределения электронов в состояниях непрерывного спектра. Системы квантовых точек могут быть использованы в качестве модулей при создании одноэлектронных квантовых насосов и турникетов, а также высокочастотных усилителей. Поэтому в процессе интегрирования точек в полупроводниковую матрицу, необходимо учитывать роль состояний непрерывного спектра в процессе электронного транспорта.
2. В системе двух связанных квантовых точек обнаружено существование трех каналов релаксации заряда с различными характерными величинами скоростей релаксации. Продемонстрировано, что временная эволюция зарядовой плотности определяется соотношениями между параметрами системы (положением уровней энергии, амплитудами туннельных переходов, скоростями релаксации в состоянии непрерывного спектра). Таким образом, параметрами электронного транспорта в квантовых точках можно управлять на этапе их роста, задавая нужную форму и размер.
3. Впервые показано, что система из трех связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, может быть применена для создания нового типа электронных устройств сверхмалых размеров: неадиабатического электронного насоса. Обнаружено, что периодическое изменение положения уровня энергии в средней квантовой точке приводит к возникновению ненулевого среднего туннельного тока, протекающего через систему при нулевом напряжении на туннельном контакте. Выявлено, что физическим механизмом, ответственным за полученный эффект, является различие скоростей релаксации при резонансном и нерезонансном туннелировании между квантовыми точками.
4. Обнаружено, что нестационарный туннельный ток в системе из трех связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями

непрерывного спектра, можно наблюдать при комнатных температурах для квантовых точек нанометрового размера. Устройства такого типа могут работать на гигагерцовых и субгигагерцовых частотах $\omega \simeq 10^{10} \div 10^{11} \text{ 1/sec}$ и достигать значений токов порядка наноампер и субнаноампер ($1 \text{ nA} \simeq 6 \cdot 10^9 \text{ e/sec}$).

5. Продемонстрирована возможность создания нового класса полупроводниковых приборов, принцип работы которых основан на протекании нестационарного туннельного тока. В качестве примера предложена модель нанометрового квантового эмиттера. Такие устройства можно использовать для создания квантового генератора нанометровых размеров.

ГЛАВА 6

Роль межчастичного взаимодействия при релаксации заряда в системе связанных квантовых точек

Рассмотрим особенности релаксации заряда, локализованного в системе квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия между локализованными электронами и электрон-фононного взаимодействия. Межчастичное взаимодействие в системах сверхмалых размеров значительным образом влияет на свойства электронного транспорта и на процессы релаксации заряда. В данной главе исследование роли кулоновского взаимодействия в процессах временной эволюции заряда в связанных квантовых точках проведено с использованием метода среднего поля [130], а анализ влияния электрон-фононного взаимодействия выполнен с помощью диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов [67]. Показано, что межчастичные корреляции коренным образом модифицируют процесс релаксации заряда, приводя к возникновению принципиально новых эффектов, не наблюдавшихся в отсутствие в системе кулоновского и электрон-фононного взаимодействия [285, 289–291]. Обсуждаемые в данной главе эффекты могут быть применены для обеспечения высокоскоростного высокоточного одноэлектронного транспорта в наноструктурах и создания на их основе новых типов приборов наноэлектроники: сверхбыстрых зарядовых переключателей, устройств динамической памяти и зарядовых ловушек.

§ 6.1. Нестационарные туннельные процессы в связанных квантовых точках, взаимодействующих с резервуаром, при наличии кулоновского взаимодействия

Рассмотрим влияние кулоновского взаимодействия на нестационарный электронный транспорт в связанных квантовых точках [285]. Результаты исследований электронного транспорта в связанных квантовых точ-

ках можно применять для создания электронных устройств, основанных на квантовой кинетике индивидуальных локализованных состояний [204–206]. Однако, использование одиночных и связанных квантовых точек при создании современных устройств нанoeлектроники требует тщательного анализа следующих проблем, неизбежно возникающих в системах сверхмалых размеров и напрямую влияющих на особенности электронного транспорта: неравновесного распределения заряда, процессов релаксации заряда и нестационарных эффектов [229–235].

Исследуем релаксацию заряда в системе двух связанных квантовых точек с одноэлектронными уровнями энергии ε_1 и ε_2 соответственно при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов (рис. 6.1). Учтем, что квантовая точка с уровнем энергии ε_2 связана с состояниями непрерывного спектра резервуара. Тогда гамильтониан исследуемой системы имеет следующий вид:

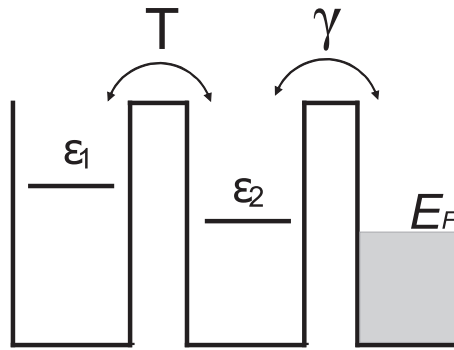


Рис. 6.1. Схематическое изображение уровней энергии в системе связанных квантовых точек. Одна из квантовых точек (вторая) взаимодействует с состояниями непрерывного спектра.

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \varepsilon_1 c_{1\sigma}^+ c_{1\sigma} + \sum_{\sigma} \varepsilon_2 c_{2\sigma}^+ c_{2\sigma} + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} T (c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma}) + \\ + \sum_{k,\sigma} T_k (c_{k\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^+ c_{k\sigma}) + U_2 n_{2\sigma} n_{2-\sigma} + U_1 n_{1\sigma} n_{1-\sigma} \quad (6.1)$$

где T - амплитуда туннельных переходов между уровнями энергии первой и второй точек. T_k - амплитуда туннельных переходов между локализованным во второй квантовой точке состоянием с энергией ε_2 и состояниями непрерывного спектра резервуара. $c_{1\sigma}^+/c_{1\sigma}$ ($c_{2\sigma}^+/c_{2\sigma}$) и $c_{k\sigma}^+/c_{k\sigma}$ - операторы рождения/уничтожения электронов со спином σ на уровне энергии ε_1 (ε_2) первой (второй) квантовой точки и в состояниях непрерывного спектра (k) соответственно. $U_{1(2)}$ - величина кулоновского взаимодействия на

уровнях энергии квантовых точек.

Для анализа влияния кулоновского взаимодействия на временную эволюцию заряда используем метод среднего поля, основанный на предположении, что положение уровня энергии квантовой точки зависит от величины кулоновского взаимодействия [130]. Влияние кулоновского взаимодействия приводит к плавному изменению положения уровня энергии квантовой точки. В результате положение уровня энергии квантовой точки в каждый момент времени отличается от исходного за счет наличия в системе кулоновского взаимодействия и может быть определено по формуле:

$$\tilde{\varepsilon}_i = \varepsilon_i + U \cdot \langle n_i(t) \rangle \quad (6.2)$$

где индекс i принимает значение равное 1 или 2 для первой и второй квантовой точки соответственно. Тогда в выражениях, описывающих релаксацию заряда без учета кулоновского взаимодействия, необходимо заменить величины уровней энергии ε_i на соответствующие значения $\tilde{\varepsilon}_i$ и решать самосогласованную систему уравнений для чисел заполнения $n_i(t)$, состоящую из уравнений (5.30), (5.31), (5.32), (5.33), (6.2). Далее рассмотрим парамагнитный случай, когда выполнены условия $n_{i\sigma} = n_{i-\sigma} = n_i$.

Метод среднего поля можно применять для анализа релаксации локализованного заряда в связанных квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия, если выполнены условия:

$$\begin{aligned} |E_1 - E_1^*| &\ll \min(|E_1|, |E_2|) \\ |E_2 - E_2^*| &\ll \min(|E_1|, |E_2|) \\ |E_1 - E_2^*| &\ll \min(|E_1|, |E_2|) \end{aligned} \quad (6.3)$$

Неравенства (6.3) означают, что можно разделить быстро осциллирующие функции Грина G_{11}^R и G_{22}^R и медленно изменяющиеся со временем функции $n_1(t)$ и $n_2(t)$. Условия (6.3) аналогичны приближениям, которые выполнены в адиабатическом подходе. При использовании метода среднего поля основным эффектом, который возникает при учете кулоновского взаимодействия локализованных электронов, является изменение величины расстройки между уровнями энергии ε_1 и ε_2 . Поэтому для простоты в данном параграфе учтем кулоновское взаимодействие локализованных

электронов только во второй квантовой точке, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра. Приведенные далее результаты позволят убедиться в том, что учет кулоновского взаимодействия в обеих квантовых точках приводит к незначительному изменению полученных результатов.

Обсудим применимость приближения среднего поля. Для стационарного случая, когда электронные числа заполнения изменяются за счет вариации напряжения на затворе, важным является выполнение условий $U/\gamma \geq 1$ и $(\varepsilon_i - \varepsilon_F)/\gamma \geq 1$ между параметрами системы. Для нестационарных систем невыполнение приведенных выше условий не является критичным. Медленное изменение положения уровней энергии при релаксации заряда, локализованного в квантовых точках, позволяет использовать метод среднего поля для анализа электронного транспорта даже в случае больших величин кулоновского взаимодействия. Необходимо также подчеркнуть, что в начальный момент времени уровни энергии расположены значительно выше уровня Ферми $(\varepsilon_i - \varepsilon_F)/\gamma \gg 1$, поэтому релаксация заряда происходит в незаполненные состояния.

Результаты расчетов временной эволюции электронных чисел заполнения представлены на рис.6.3-6.8. Проанализируем особенности релаксации чисел заполнения в случае слабого кулоновского взаимодействия между локализованными электронами, когда выполнено соотношение $Un_2(t)/\gamma \leq \Delta\varepsilon/\gamma$ (рис.6.4). В случае положительной начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках ($\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ рис.6.2а) скорость релаксации заряда в первой квантовой точке увеличивается (рис.6.4а, кривая серого цвета) по сравнению со скоростью релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия (рис.6.4а, кривая черного цвета). Одновременно увеличивается амплитуда чисел заполнения во второй квантовой точке, связанной с состояниями непрерывного спектра (рис.6.4б). Увеличение скорости релаксации обусловлено уменьшением величины начальной расстройки $\Delta\varepsilon/\gamma$ при релаксации заряда, вызванным наличием кулоновского взаимодействия локализованных электронов (рис.6.2а, рис.6.3). На рисунке 6.3 показано как изменяется величина расстройки со временем. В отсутствие кулоновского взаимодействия величина расстройки остается постоянной (рис.6.3 пунктирная кривая серого цвета). Наличие кулоновского взаимодействия локализованных электронов приводит к уменьшению начальной расстройки при релаксации заряда, за исключением начального момента и временного интервала, когда практиче-

ски весь заряд прорелаксировал в состояния непрерывного спектра и система связанных квантовых точек становится пустой. На этом этапе временной эволюции наличием кулоновского взаимодействия можно пренебречь (рис.6.3, кривая серого цвета).

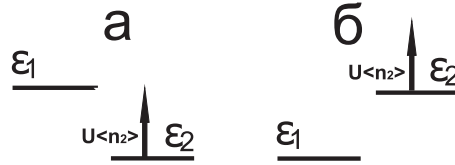


Рис. 6.2. Схематическое изображение изменения расстройки между уровнями энергии в системе связанных квантовых точек за счет кулоновского взаимодействия. Одна из квантовых точек (вторая) взаимодействует с состояниями непрерывного спектра.

В случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии в точках ($\epsilon_1 < \epsilon_2$ рис.6.2б) происходит увеличение значения расстройки даже для малых значений кулоновского взаимодействия (рис.6.3, кривая черного цвета). Поэтому, при наличии кулоновского взаимодействия скорость релаксации заряда в первой квантовой точке уменьшается (рис.6.4а, пунктирная кривая черного цвета) по сравнению со скоростью релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия (рис.6.4б, пунктирная кривая черного цвета), когда величина расстройки остается постоянной.

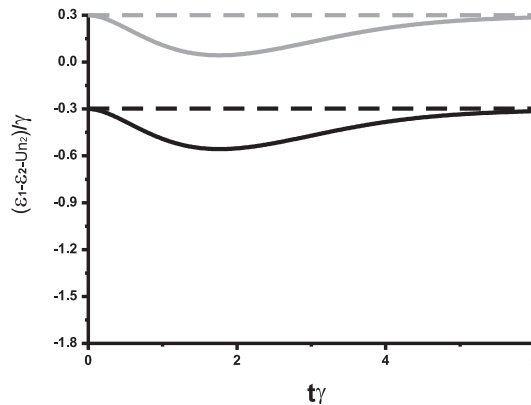


Рис. 6.3. Временная эволюция расстройки между уровнями энергии в квантовых точках. $U/\gamma = 0$ и положительная расстройка в начальный момент времени $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0, 3$ -серая пунктирная кривая; $U/\gamma = 0$ и отрицательная расстройка в начальный момент времени $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/\gamma = (6, 0 - 6, 3)/1 = -0, 3$ -черная пунктирная кривая; $U/\gamma = 3$ и положительная расстройка в начальный момент времени $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0, 3$ -серая кривая; $U = 3$ и отрицательная расстройка в начальный момент времени $(\epsilon_1 - \epsilon_2)/\gamma = (6, 0 - 6, 3)/1 = -0, 3$ -черная кривая.

Рассмотрим теперь особенности релаксации заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра,

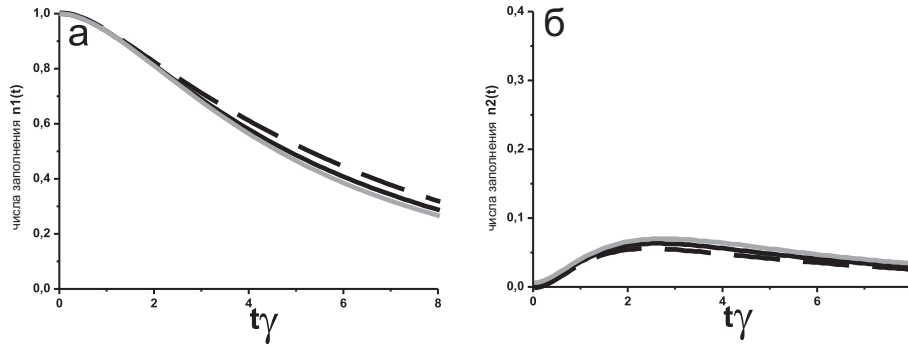


Рис. 6.4. Временная эволюция чисел заполнения в первой а). $n_1(t)$ и во второй б). $n_2(t)$ квантовых точек. $U/\gamma = 0$ -черная кривая для положительной $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0,3$ и отрицательной $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 0 - 6, 3)/1 = -0,3$ расстройек между уровнями энергии в квантовых точках в начальный момент времени, $U/\gamma = 3$ и $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0,3$ -серая кривая, $U/\gamma = 3$ и $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 0 - 6, 3)/1 = -0,3$ -черная пунктирная кривая. Параметры $T/\gamma = 0,6$ и $\gamma = 1,0$ одинаковые для всех графиков.

в случае сильного кулоновского взаимодействия между локализованными электронами ($Un_2(t)/\gamma \geq \Delta\varepsilon/\gamma$).

Исследуем случай положительной начальной расстройки между уровнями энергии (рис.6.5). Зависимости чисел заполнения от времени в квантовых точках демонстрируют три характерных области с различными скоростями релаксации. Первая область относится к временному интервалу $0 < t < t_{02max}$ (t_{02max} - момент времени, в который числа заполнения во второй квантовой точке достигают максимального значения n_{2max} (рис.6.5б)). В момент времени t_{02max} (рис.6.5а) происходит изменение скорости релаксации чисел заполнения в первой квантовой точке (формируется провал). Соответствующее поведение расстройки между уровнями энергии показано на рисунке 6.6. Наличие кулоновского взаимодействия приводит к быстрой компенсации начальной положительной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках. Дальнейшая временная эволюция вызывает формирование отрицательной расстройки. Максимум электронной плотности во второй квантовой точке соответствует максимальному значению расстройки между уровнями энергии. На рассматриваемом временном интервале релаксация заряда в первой квантовой точке происходит с характерной скоростью релаксации очень близкой к величине γ_{res} . Рост величины кулоновского взаимодействия на первом этапе релаксации приводит к слабому уменьшению скорости релаксации по сравнению со случаем, когда релаксация происходит без учета кулоновского взаимодействия.

Вторая область релаксации заряда относится к временному интервалу $t_{02max} < t < t_{01min}$ (t_{01min} - момент времени, в который числа заполнения

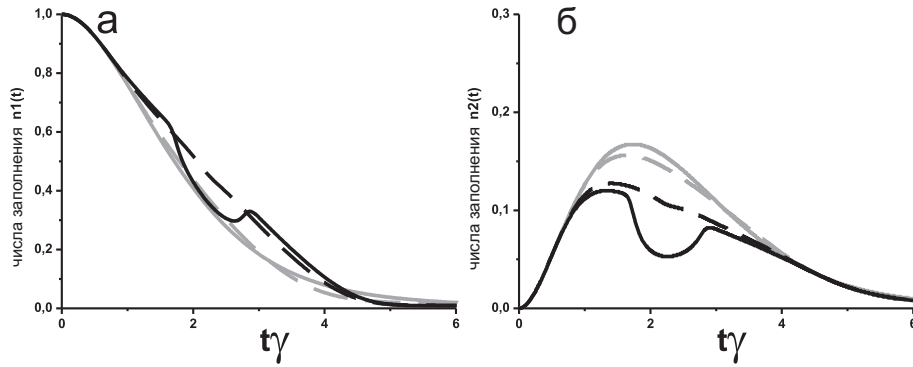


Рис. 6.5. Временная эволюция чисел заполнения в первой а). $n_1(t)$ и во второй б). $n_2(t)$ квантовых точек. $U/\gamma = 0$ -серая кривая, $U/\gamma = 6$ -серая пунктирная кривая, $U/\gamma = 12$ -черная пунктирная кривая, $U/\gamma = 14$ -черная кривая. Параметры $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0, 3$, $T/\gamma = 0, 6$ и $\gamma = 1, 0$ одинаковые для всех графиков.

в первой квантовой точке достигают минимального значения n_{1min}). На втором этапе заряд, локализованный в начальный момент в первой квантовой точке, релаксирует с характерной скоростью очень близкой к величине γ_{nonres} . Временная эволюция чисел заполнения в обеих квантовых точках демонстрирует одновременное образование провала (рис.6.5а,б), который соответствует локальному минимуму эффективной расстройки (рис.6.6). Эффект образования провала связан с перераспределением заряда между квантовыми точками через канал релаксации с соответствующей характерной скоростью релаксации ($|E_1 - E_2^*|$) (ур.(5.30)) за счет наличия кулоновского взаимодействия между локализованными электронами. Перераспределение заряда значительно влияет на поведение системы во втором временном интервале из-за большой величины действительной части скорости релаксации ($|E_1 - E_2^*|$), которая пропорциональна величине $Un_2(t)$ (рис.6.7 кривая серого цвета). На первом временном интервале релаксация происходит регулярным образом, потому что действительная часть в выражении для скорости релаксации ($|E_1 - E_2^*|$) пренебрежимо мала или вообще отсутствует из-за малой амплитуды чисел заполнения во второй квантовой точке. Вклад от механизма перераспределения заряда в процесс релаксации становится значительным в момент времени, когда амплитуда чисел заполнения во второй квантовой точке принимает максимальное значение. Этот эффект самосогласованным образом влияет на динамику релаксации заряда в рассматриваемой системе за счет изменения величины расстройки между уровнями энергии в квантовых точках.

В третьей области релаксация заряда происходит с характерной скоростью очень близкой к величине γ_{res} . Наличие третьей области связано с

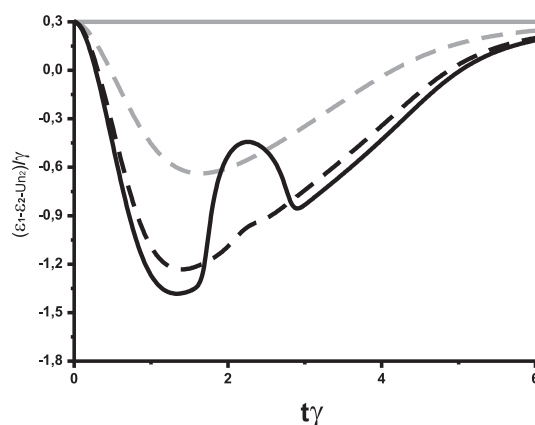


Рис. 6.6. Временная эволюция расстройки между уровнями энергии в квантовых точках для случая положительной расстройки в начальный момент времени $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0,3$. $U/\gamma = 0$ -серая кривая; $U/\gamma = 6$ -серая пунктирная кривая; $U/\gamma = 12$ -черная пунктирная кривая; $U/\gamma = 14$ -черная кривая.

уменьшением амплитуды чисел заполнения во второй квантовой точке. Это приводит к увеличению скорости релаксации по сравнению с предыдущим временным интервалом. Наличие кулоновского взаимодействия слабо влияет на расстройку между уровнями энергии по сравнению со вторым временным интервалом, поскольку на третьем этапе релаксации заряд практически полностью отсутствует в системе. Таким образом на третьем этапе релаксации перераспределением заряда можно пренебречь. Дальнейшая эволюция заряда показывает стремление величины эффективной расстройки к значению расстройки в начальный момент времени.

Таким образом, полученные результаты показывают, что кулоновское взаимодействие значительно влияет на релаксацию заряда в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с резервуаром и приводит к образованию нескольких характерных областей с различными скоростями релаксации. Впервые показано, что в связанных квантовых точках релаксация заряда при наличии кулоновского взаимодействия происходит в три различных скоростями релаксации. К настоящему моменту было обнаружено наличие трех различных скоростей релаксации в одной квантовой точке с кулоновским взаимодействием, связанной с состояниями непрерывного спектра [245]. В связанных квантовых точках было продемонстрировано наличие только двух различных скоростей релаксации [242, 243] при отсутствии в системе кулоновского взаимодействия.

Для анализа механизма релаксации заряда исследуем зависимости от времени показателей экспонент, которые определяют скорости релаксации заряда каждого из каналов (мод) в квантовых точках. Также исследуем

поведение предэкспоненциальных множителей в зависимости от времени, которые описывают временную эволюцию и перераспределение заряда для каждого из каналов релаксации в квантовых точках. Проанализируем наиболее интересный случай положительной начальной расстройки, когда кулоновское взаимодействие приводит к формированию провала на одном из этапов релаксации заряда. В этом случае кулоновское взаимодействие приводит к принципиально новому закону релаксации заряда по сравнению с полученными ранее [242, 243, 245].

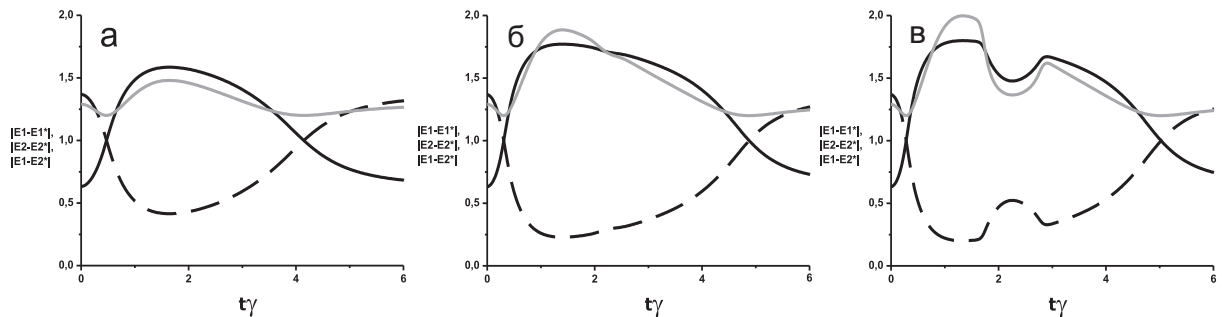


Рис. 6.7. Временная эволюция скорости релаксации для каждого из каналов релаксации при значении параметров системы $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0,3$; $T/\gamma = 0,6$; $\gamma = 1,0$. $|E_1 - E_1^*|$ -черная кривая; $|E_2 - E_2^*|$ -черная пунктирная кривая; $|E_1 - E_2^*|$ -серая кривая; а). $U/\gamma = 6$; б). $U/\gamma = 12$; в). $U/\gamma = 14$.

Рассмотрим сначала временную эволюцию показателей экспонент (рис.6.7). В отсутствии кулоновского взаимодействия скорость релаксации во втором канале (второй моде) $|E_2 - E_2^*|$ всегда превосходит скорость релаксации в первом канале (первой моде) $|E_1 - E_1^*|$. При наличии кулоновского взаимодействия во второй квантовой точке в начальный момент времени скорость релаксации во втором канале каждой из точек также превосходит скорость релаксации в первом канале. Наличие кулоновского взаимодействия приводит к формированию провала в зависимости скорости релаксации от времени во второй моде и к образованию пика в первой моде (рис.6.7а,б). Максимальное значение скорости релаксации в первом канале в точности соответствует минимальному значению скорости релаксации во втором канале. При временах $t\gamma \geq 6$ временная эволюция заряда происходит с постоянными значениями скоростей релаксации в обоих каналах, совпадающими со скоростями релаксации в отсутствии кулоновского взаимодействия. С ростом величины кулоновского взаимодействия происходит расщепление пика в первом канале релаксации и провала во втором. Образующиеся при этом пики в первом канале релаксации совпадают с провалами во втором канале релаксации (рис.6.7в).

Исследуем временную эволюцию предэкспоненциальных множителей (амплитуд мод) для каждого из каналов релаксации в квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия. Во второй квантовой точке предэкспоненциальные множители изменяются со временем одинаковым образом ($D(t)$ и $F(t)$ в выражении (5.33)) (кривая серого цвета на рис. 6.8). Временная эволюция предэкспоненциальных множителей в первой квантовой точке различается для различных каналов релаксации ($A(t)$ и $C(t)$ в выражении (5.31)).

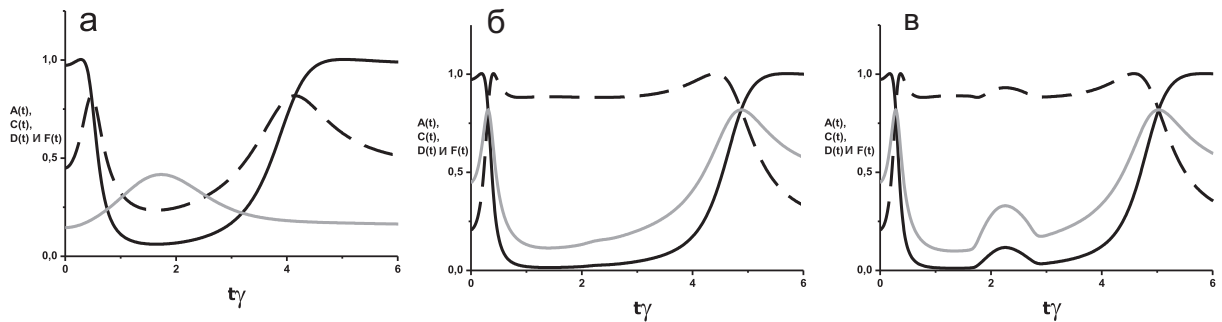


Рис. 6.8. Временная эволюция амплитуды релаксации для каждого из каналов релаксации при значении параметров системы $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0, 3$; $T/\gamma = 0, 6$; $\gamma = 1, 0$. Предэкспоненциальный фактор для первого канала релаксации в первой квантовой точке $A(t)$ -черная кривая; предэкспоненциальный фактор для второго канала релаксации в первой квантовой точке $C(t)$ -черная пунктирная кривая; предэкспоненциальные факторы для первого и второго каналов релаксации во второй квантовой точке $D(t)$ и $F(t)$ -серая кривая; а). $U/\gamma = 6$; б). $U/\gamma = 12$; в). $U/\gamma = 14$.

В отсутствии кулоновского взаимодействия амплитуда первой моды в первой квантовой точке превосходит амплитуду второй моды в первой квантовой точке и амплитуды обеих мод во второй точке. При наличии кулоновского взаимодействия во второй квантовой точке, в начальный момент времени амплитуда первой моды в первой квантовой точке также является наибольшей. Временная эволюция амплитуд мод во второй квантовой точке ($D(t)$ и $F(t)$ на рис.6.8б) демонстрирует с ростом времени формирование максимума, который совпадает с минимумом амплитуд в обоих каналах релаксации в первой квантовой точке для малых величин кулоновского взаимодействия. С ростом величины кулоновского взаимодействия (рис.6.8б) амплитуда первого канала релаксации первой квантовой точки $A(t)$ и амплитуды обоих каналов релаксации второй точки ($D(t)$ и $F(t)$) стремятся к нулю. Одновременно амплитуда второго канала релаксации первой квантовой точки $C(t)$ принимает значение равное единице. На больших временах амплитуды мод в обеих квантовых точках совпадают

со значениями в отсутствие кулоновского взаимодействия. С ростом величины кулоновского взаимодействия происходит одновременное формирование пиков в зависимостях амплитуд каналов релаксации от времени для обеих квантовых точек (рис. 6.8в).

Сопоставляя результаты анализа временных зависимостей показателей экспонент, определяющих скорости релаксации заряда в каждом из каналов релаксации, и поведение предэкспоненциальных множителей, отвечающих за изменение во времени амплитуд каналов релаксации, можно сделать следующий вывод: в рассматриваемой системе квантовых точек наличие кулоновского взаимодействия локализованных электронов приводит к перераспределению заряда между каналами релаксации внутри отдельной квантовой точки. В начальный момент времени большая часть заряда находится в первой моде первой квантовой точки, далее происходит перераспределение заряда таким образом, что заряд практически полностью локализуется во второй моде первой квантовой точки. Последующая временная эволюция приводит к обратной перекачке большей части заряда в первую моду первой квантовой точки. Во второй квантовой точке на протяжении всего процесса релаксации заряд остается распределенным поровну между релаксационными модами.

Таким образом, основным механизмом немонотонной релаксации заряда в связанных квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия является перераспределение заряда между каналами релаксации в отдельной точке.

Проведем сравнение результатов, полученных для рассмотренной выше модели и для наиболее часто реализуемого экспериментально случая, когда кулоновское взаимодействие учитывается в обеих квантовых точках. На рисунке 6.9 представлена временная эволюция заряда в обеих квантовых точках. Кривая серого цвета соответствует результатам, полученным для случая, когда кулоновское взаимодействие учтено только во второй точке, а пунктирная кривая черного цвета соответствует расчетам, проведенным при учете кулоновского взаимодействия в обеих точках. В случае, когда кулоновское взаимодействие учтено в обеих точках, происходит ускоренная компенсация начальной положительной расстройки между уровнями энергии в точках, при этом общий вид релаксационных зависимостей не изменяется. Таким образом, представляется разумным рассматривать кулоновское взаимодействие только в одной из точек, так как оно приводит

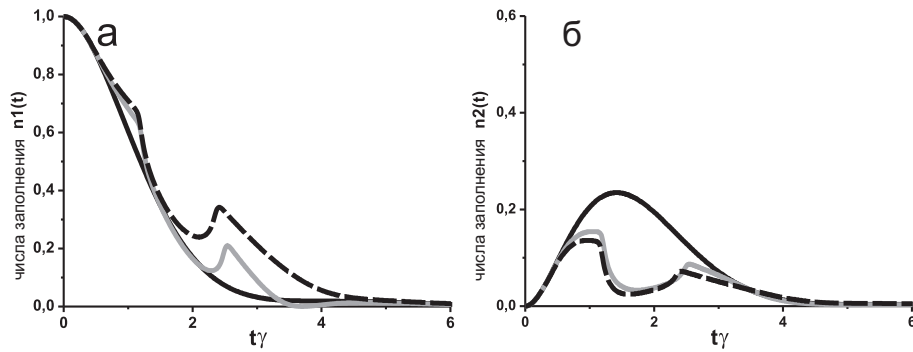


Рис. 6.9. Временная эволюция чисел заполнения в первой а). $n_1(t)$ и во второй б). $n_2(t)$ квантовых точек без учета кулоновского взаимодействия ($U_1/\gamma = 0$ и $U_2/\gamma = 0$ -черная кривая), с учетом кулоновского взаимодействия во второй квантовой точке ($U_1 = 0$ и $U_2 = 14$ -серая кривая), с учетом кулоновского взаимодействия в обеих квантовых точках ($U_1/\gamma = 3$ и $U_2/\gamma = 14$ - черная пунктирная кривая). Параметры $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/\gamma = (6, 3 - 6, 0)/1 = 0, 3$, $T/\gamma = 0, 6$ и $\gamma = 1, 0$ одинаковые для всех графиков.

к изменению величины начальной расстройки, которая непосредственно влияет на процессы перераспределения заряда между каналами релаксации как в отдельной точке, так и между точками.

Таким образом, впервые показано, что временная эволюция заряда, локализованного в начальный момент в квантовых точках с кулоновским взаимодействием, связанных с состояниями непрерывного спектра резервуара, происходит немонотонным образом и протекает через три характерных области с различными скоростями релаксации. Продемонстрировано, что основным механизмом немонотонной релаксации заряда в связанных квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия является перераспределение заряда между каналами релаксации в отдельной точке. Обнаруженный эффект практически полной перекачки заряда между различными модами внутри одной квантовой точки может быть использован для манипулирования зарядом в системе посредством его аккумуляции в различных пространственных областях и для создания элементов динамической памяти, основанных на переключении между несколькими стабильными состояниями.

§ 6.2. Особенности бифуркационного режима релаксации заряда в связанных квантовых точках

Системы связанных квантовых точек значительно отличаются от одиночных квантовых точек из-за наличия возможности для изменения величины туннельной связи между точками [218, 220]. Это является физиче-

ской причиной образования нелинейности и, следовательно, приводит к существованию бистабильности [222] и бифуркаций [221], однако бифуркации были исследованы в системе связанных квантовых точек без учета кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Обнаруженные эффекты позволяют создавать на основе связанных квантовых точек логические переключатели, используя явление сверхбыстрого переключения между двумя стабильными состояниями.

Рассмотрим процессы релаксации заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия в одной из точек (в точке с уровнем энергии ε_1 - первой квантовой точке) [289]. Для анализа влияния кулоновского взаимодействия на временную эволюцию заряда в системе используем, как и в параграфе **6.2** метод среднего поля. Влияние кулоновского взаимодействия приводит к тому, что положение уровня энергии квантовой точки в каждый момент времени отличается от исходного за счет наличия кулоновского взаимодействия и может быть определено с помощью выражения:

$$\tilde{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 + U + U \cdot (\langle n_1(t) \rangle - 1) \quad (6.4)$$

Поскольку релаксация заряда происходит из заполненного в начальный момент времени состояния в первой квантовой точке, то будем считать, что начальное положение уровня энергии соответствует величине энергии $\varepsilon_1 + U$, где ε_1 - энергия пустого уровня. Таким образом, расстройка между уровнями энергии в точках в начальный момент времени равна: $\Delta\varepsilon/\gamma = \varepsilon_1 + U - \varepsilon_2$.

В выражениях, описывающих релаксацию заряда без учета кулоновского взаимодействия, необходимо провести замену величины ε_i на $\tilde{\varepsilon}_i$ и решать самосогласованную систему уравнений для чисел заполнения $n_i(t)$, состоящую из выражений (5.30), (5.31), (5.32), (5.33) и (6.2). Будем рассматривать парамагнитный случай, когда выполнены условия $n_{i\sigma} = n_{i-\sigma} = n_i$.

Рассмотрим сначала случай резонансного туннелирования между уровнями энергии в квантовых точках $\varepsilon_1 + U \simeq \varepsilon_2$. На рисунке **6.10а,б** показаны результаты расчетов временной эволюции чисел заполнения в первой ($n_1(t)$) и во второй ($n_2(t)$) квантовых точках для различных величин кулоновского взаимодействия. Релаксация заряда на начальном этапе при учете кулоновского взаимодействия (кривая серого цвета на рис. **6.10а,б**) проис-

ходит со скоростью превышающей скорость релаксации в отсутствие кулоновских корреляций локализованных электронов (кривая черного цвета на рис. 6.10а,б). Для рассматриваемой геометрии связанных квантовых точек (рис. 6.1) существует выделенное критическое значение величины кулоновского взаимодействия (для рассматриваемой области параметров в системе $U/\gamma = 4$). Для величин кулоновского взаимодействия меньших критического значения, релаксация заряда происходит монотонным образом (кривая серого цвета на рис. 6.10а,б). Если величина кулоновского взаимодействия превосходит критическую величину, зависимость чисел заполнения от времени является немонотонной: временная эволюция чисел заполнения происходит в несколько этапов с различными характерными скоростями релаксации (пунктирная кривая черного цвета на рис. 6.10а,б). Таким образом, наблюдаемое поведение релаксации заряда демонстрирует особенности, соответствующие особенностям релаксации для случая, когда кулоновское взаимодействие учитывается только во второй квантовой точке (квантовой точке с уровнем энергии ε_2), связанной с состояниями непрерывного спектра в берегах туннельного контакта (см. параграф 6.1).

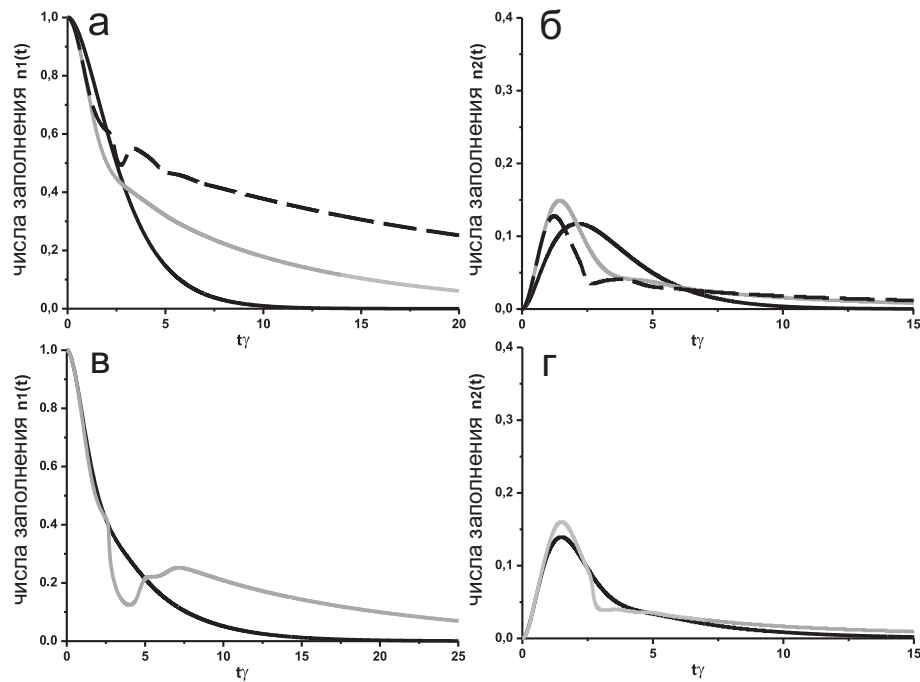


Рис. 6.10. Временная эволюция чисел заполнения в первой а), в). $n_1(t)$ и во второй б), г). $n_2(t)$ квантовых точек. Графики а). и б). соответствуют резонансному туннелированию между квантовыми точками $(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_2)/\gamma = 0, 0$. $U/\gamma = 0$ -черная кривая, $U/\gamma = 2$ -серая кривая, $U/\gamma = 4$ -черная пунктирная кривая. Графики в). и г). соответствуют туннелированию между квантовыми точками при наличии расстройки $(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_2)/\gamma = 1, 0$. $U/\gamma = 0$ -черная кривая, $U/\gamma = 4$ -серая кривая. Параметры $T/\gamma = 0,6$ и $\gamma = 1,0$ одинаковы для всех графиков.

Рассмотрим случай нерезонансного туннелирования между уровнями энергии в квантовых точках, когда величина расстройки имеет значение сопоставимое с величинами T и γ . Будем исследовать процессы релаксации заряда для различных знаков расстройки. Если начальная расстройка принимает положительные значения ($\varepsilon_1 + U > \varepsilon_2$), то для малых величин кулоновского взаимодействия ($U/\gamma = 0,5$, $U/\gamma = 1,0$) скорость релаксации чисел заполнения в первой квантовой точке превосходит скорость релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия (рис.6.11а). С ростом величины кулоновского взаимодействия, при соблюдении условия $\varepsilon_2 > \varepsilon_1$, выполняется следующее соотношение $|U(n_1(t) - 1)| = \Delta\varepsilon$. Таким образом, кулоновское взаимодействие приводит к полной компенсации расстройки в определенный момент времени. В момент полной компенсации расстройки туннелирование между квантовыми точками происходит резонансным образом, и скорость релаксации заряда достигает максимального значения ($U/\gamma = 1,5$ на рис.6.11а). С ростом величины кулоновского взаимодействия происходит быстрая компенсация расстройки с последующим изменением знака расстройки. Смена знака расстройки приводит к уменьшению скорости релаксации ($U/\gamma = 2,5$ на рис.6.11а). В случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках ($\varepsilon_1 + U < \varepsilon_2$), наличие кулоновского взаимодействия приводит к увеличению начальной расстройки и, как следствие, к уменьшению скорости релаксации чисел заполнения в первой точке (рис.6.11в). В этом случае релаксация заряда происходит в два этапа с разными характерными скоростями релаксации. Скорость релаксации заряда на первом этапе превосходит скорость релаксации на втором.

В случае сильного кулоновского взаимодействия локализованных электронов ($U/\gamma = 4$ на рис.6.10в,г) релаксация заряда происходит в три этапа с различными скоростями релаксации, что соответствует временной эволюции заряда в квантовых точках для случая, когда кулоновское взаимодействие учитывается только во второй квантовой точке (см. параграф 6.1). Таким образом, для рассмотренной области параметров при наличии кулоновского взаимодействия в первой квантовой точке временная эволюция заряда, локализованного в начальный момент в системе, демонстрирует поведение аналогичное случаю, когда кулоновское взаимодействие учтено только во второй точке.

Исследуем особенности релаксации заряда, возникающие в связанных

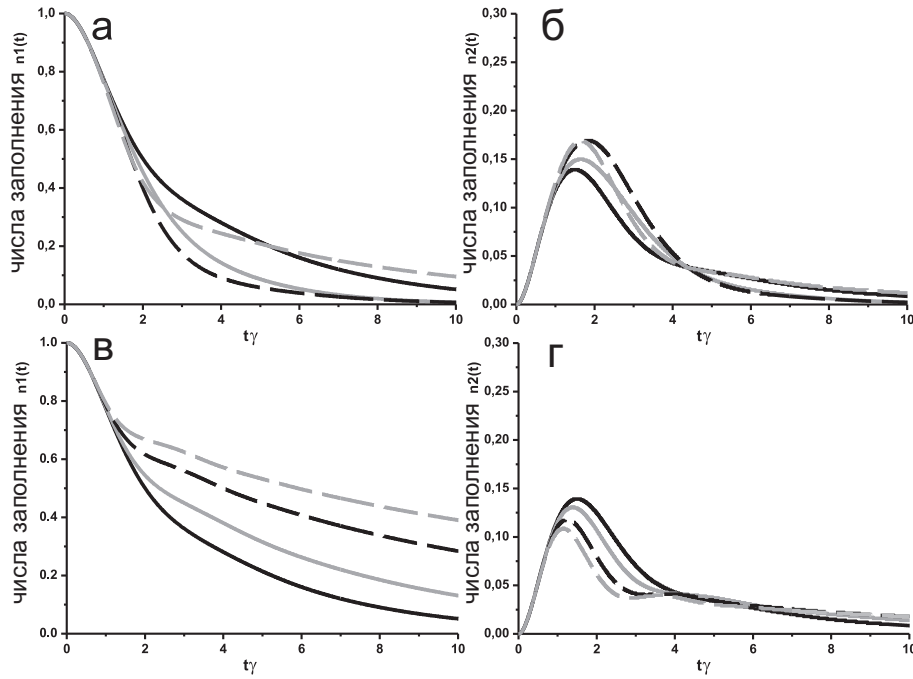


Рис. 6.11. Временная эволюция чисел заполнения в первой а), в). $n_1(t)$ и во второй б), г). $n_2(t)$ квантовых точек. Графики а) и б) соответствуют туннелированию между квантовыми точками при положительной начальной расстройке $(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_2)/\gamma = 1, 0$. Графики в) и г) соответствуют туннелированию между квантовыми точками при наличии отрицательной начальной расстройки $(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_2)/\gamma = -1, 0$. Параметры $T/\gamma = 0,6$ и $\gamma = 1,0$ одинаковы для всех графиков. $U/\gamma = 0,0$ -черная кривая, $U/\gamma = 0,5$ -серая кривая, $U/\gamma = 1,5$ -черная пунктирная кривая, $U/\gamma = 2,5$ -серая пунктирная кривая.

квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия в первой квантовой точке в случае, когда величина кулоновского взаимодействия намного превосходит величины параметров системы (T и γ) и сопоставима (или даже превосходит) с величиной сильной положительной расстройки ($\Delta\varepsilon \gg T, \gamma$; $\Delta\varepsilon/\gamma \simeq U/\gamma$). При таком наборе параметров системы релаксация заряда происходит через два стабильных режима, каждый из которых характеризуется значительно различающимися скоростями релаксации (кривые черного и серого цвета на рис.6.12).

При выполнении описанных выше условий в системе существует пороговый момент времени, после которого скорость релаксации резко изменяется от одного устойчивого значения к другому. Такая особенность релаксации заряда называется бифуркацией. С ростом величины кулоновского взаимодействия достижение порогового момента времени, соответствующего возникновению бифуркации, происходит быстрее (кривые черного и серого цвета на рис.6.12а). Таким образом, можно изменять момент наступления бифуркации, варьируя величину начальной расстройки и ве-

личину кулоновского взаимодействия. Следовательно, можно управлять параметрами электронного транспорта на этапе роста квантовых точек.

При наличии кулоновского взаимодействия во второй квантовой точке в процессе релаксации заряда не происходит возникновения бифуркационного режима. Физической причиной возникновения бифуркации при учете кулоновского взаимодействия в первой квантовой точке и ее отсутствия при учете кулоновских корреляций во второй точке является рассматриваемая геометрия исследуемой системы: релаксация заряда в состоянии непрерывного спектра, локализованного в первой квантовой точке, происходит через промежуточную систему - вторую квантовую точку. Для релаксации заряда из второй квантовой точки существует два канала: туннелирование в первую точку и прямое туннелирование в состояние непрерывного спектра. Поэтому, при учете кулоновского взаимодействия в первой квантовой точке временная эволюция заряда происходит более резким образом из-за наличия только одного канала для релаксации, что и приводит к формированию бифуркации.

Для детального анализа процессов релаксации рассмотрим зависимости от времени показателей экспонент, которые определяют скорости релаксации заряда каждой из мод в квантовых точках (рис.6.12в). Исследуем также поведение предэкспоненциальных множителей, которые описывают временную эволюцию и перераспределение заряда для каждой из мод в квантовых точках, в зависимости от времени (рис.6.12г).

Рассмотрим временную эволюцию показателей экспонент (рис.6.12в). Для набора параметров системы, при которых наблюдается бифуркация заряда, скорости релаксации в обеих модах демонстрируют резкий переход между двумя стационарными значениями. Скорость релаксации первой моды скачкообразно уменьшается, а скорость релаксации второй моды - увеличивается. После бифуркации релаксация заряда происходит с одинаковыми скоростями в обеих модах.

Проанализируем временную эволюцию предэкспоненциальных множителей при наличии кулоновского взаимодействия. Временная эволюция предэкспоненциальных множителей в первой квантовой точке различается для различных каналов релаксации. Во второй квантовой точке предэкспоненциальные множители изменяются со временем одинаковым образом. Для соответствующих бифуркации параметров системы происходит резкое переключение между двумя стационарными значениями амплитуд кана-

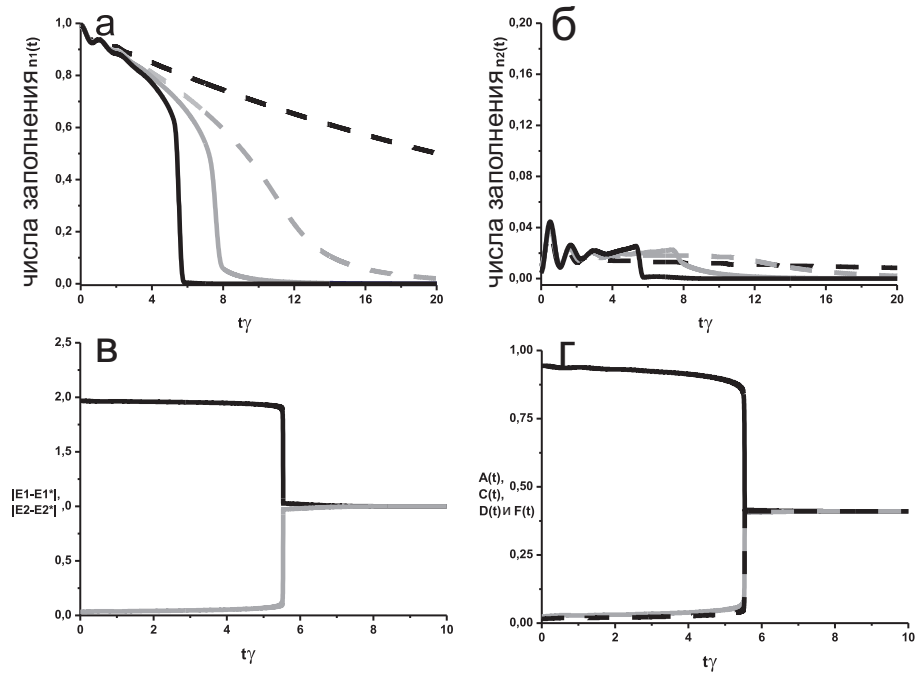


Рис. 6.12. а). Временная эволюция чисел заполнения в первой квантовой точке $n_1(t)$. $U/\gamma = 0, 0$ -черная пунктирная кривая, $U/\gamma = 4, 0$ -серая пунктирная кривая, $U/\gamma = 6, 0$ -серая кривая, $U/\gamma = 7, 0$ -черная кривая. б). Временная эволюция чисел заполнения во второй квантовой точке $n_2(t)$. $U/\gamma = 0, 0$ -черная пунктирная кривая, $U/\gamma = 4, 0$ -серая пунктирная кривая, $U/\gamma = 6, 0$ -серая кривая, $U/\gamma = 7, 0$ -черная кривая. в). Временная эволюция скоростей релаксации в первой $|E_1 - E_1^*|$ и во второй $|E_2 - E_2^*|$ релаксационных модах при значении кулоновского взаимодействия $U/\gamma = 7, 0$. г). Временная эволюция амплитуды релаксации первой моды в первой квантовой точке $A(t)$ - черная кривая, второй моды в первой квантовой точке $C(t)$ - серая кривая, первой и второй мод во второй квантовой точке $D(t)$ и $F(t)$ - черная пунктирная кривая при значении кулоновского взаимодействия $U/\gamma = 7, 0$. Параметры $T/\gamma = 0, 8$, $\gamma = 1, 0$ и $(\varepsilon_1 + U - \varepsilon_2)/\gamma = 6, 0$ одинаковы для всех графиков.

лов релаксации. Амплитуда первого канала релаксации в первой квантовой точке скачкообразно уменьшается. Амплитуда второго канала релаксации в первой квантовой точке и амплитуды обоих каналов релаксации во второй точке увеличиваются. Эволюция системы после бифуркации демонстрирует релаксацию с одинаковыми амплитудами во всех четырех каналах релаксации. Следовательно, кулоновское взаимодействие приводит к равномерному распределению заряда между каналами релаксации в системе двух связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра.

Таким образом, впервые обнаружено явление бифуркации в процессе релаксации заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия. Показано, что можно изменять момент наступления бифуркации, варьируя величину начальной расстройки и величину кулоновского взаи-

модействия. Такая особенность системы дает возможность для управления параметрами электронного транспорта на этапе роста квантовых точек. Явление бифуркации позволяет создавать на основе связанных квантовых точек логические переключатели, функционирующие в результате эффекта сверхбыстрого переключения между двумя стабильными состояниями. Кроме того, можно проводить кодировку квантовых битов для квантовой криптографии, используя особенности временной эволюции зарядовых состояний двух связанных квантовых точек [292–294].

§ 6.3. Пленение заряда в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с резервуаром

Интересным эффектом как с фундаментальной так и с прикладной точек зрения является эффект пленения заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия [290]. В настоящее время осуществлен захват электронов в отдельных квантовых точках [251] или в двух взаимодействующих квантовых точках [252]. Исследования, связанные с поиском систем, в которых возможно пленение заряда являются актуальными из-за необходимости расширения знаний об инжектировании заряда в устройства, содержащие квантовые точки. Четкое понимание особенностей контролируемой локализации заряда позволит не только исследовать фундаментальные свойства электронного транспорта в системах нанометровых размеров, но и использовать эффект пленения заряда для осуществления транспорта электронов в квантовых турникетах и насосах. Кроме того, с использованием явления пленения заряда можно проводить кодировку квантовых битов, используя спин одиночного электрона в квантовой точке [233]. В данном параграфе будет исследована релаксация заряда в системе N квантовых точек с кулоновским взаимодействием, связанных с состояниями непрерывного спектра резервуара. Будет показано, что в предложенной систем можно эффективно локализовать заряд (даже при небольшом числе точек можно аккумулировать в системе больше половины исходного заряда).

Рассмотрим релаксацию заряда в системе N одинаковых связанных планарных квантовых точек с одноэлектронными уровнями энергии ϵ_0 , расположенными в различных точках пространства (рис.6.13). Будем рас-

смаатривать квантовые точки, для которых расстояние между одноэлектронными энергетическими уровнями превосходит остальные масштабы энергии в системе. Тогда можно считать, что в каждой точке существует только один уровень. Каждая из планарных точек взаимодействует посредством туннельных переходов только с единственной точкой с уровнем энергии ε - центральной точкой. Далее для простоты будем полагать амплитуду туннельных переходов между каждой из N точек и центральной точкой одинаковой для всех точек и равной T .

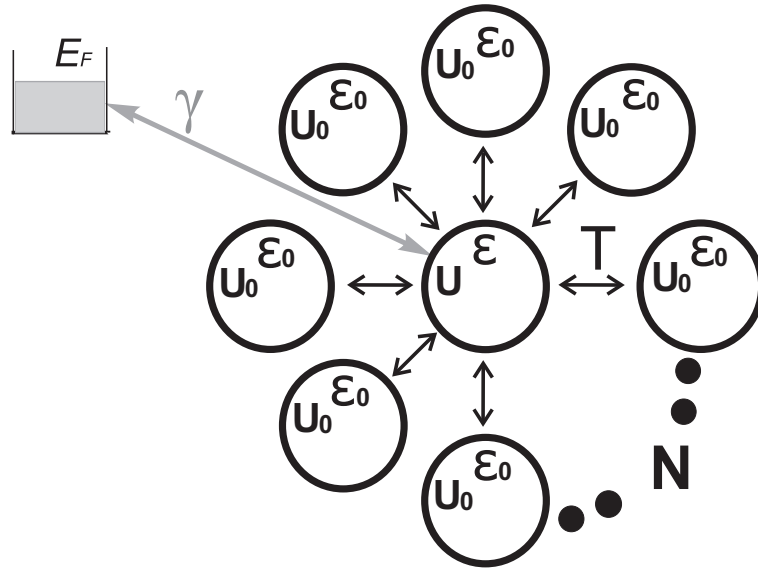


Рис. 6.13. Схематическое изображение системы связанных квантовых точек, в которой можно наблюдать пленение заряда. Одна из квантовых точек (вторая) взаимодействует с состояниями непрерывного спектра.

Квантовая точка с уровнем энергии ε связана с состояниями непрерывного спектра резервуара (рис.6.13). Учтем кулоновское взаимодействие между локализованными электронами в точках (U - величина кулоновского взаимодействия в центральной точке, а U_0 - величина кулоновского взаимодействия в каждой из N планарных точек). Тогда гамильтониан исследуемой системы будет иметь следующий вид:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \varepsilon a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + \sum_{\sigma, j=1}^N \varepsilon_0 b_{j\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} + \sum_{\sigma, j=1}^N (T b_{j\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + T a_{\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma}) + \\ & + \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k, \sigma} T_k (c_{k\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + a_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}) + U n_{a\sigma} n_{a-\sigma} + U_0 n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \quad (6.5) \end{aligned}$$

где T_k - амплитуда туннельных переходов между центральной квантовой точкой и состояниями непрерывного спектра. Амплитуды туннель-

ных переходов T и T_k не зависят от импульса и спина. Полагая плотность состояний непрерывного спектра резервуара ν_0 величиной постоянной и не зависящей от энергии, выражение для скорости релаксации в состоянии непрерывного спектра γ можно записать в виде $\gamma = \pi\nu_0 T_k^2$. $a_\sigma^+/a_\sigma(b_{j\sigma}^+/b_{j\sigma})$ - операторы рождения/уничтожения электронов на уровне энергии центральной квантовой точки (на уровнях энергии N планарных точек, взаимодействующих с центральной). Операторы c_k^+/c_k описывают рождение/уничтожение электронов в состояниях непрерывного спектра (k), $n_{a\sigma}(n_{j\sigma})$ - электронные числа заполнения квантовых точек.

Рассмотрим сначала релаксацию заряда в системе квантовых точек в случае, когда кулоновское взаимодействие локализованных электронов отсутствует во всей системе ($U = U_0 = 0$). Будем исследовать временную эволюцию заряда для такой конфигурации системы, когда в начальный момент времени весь заряд локализован в одной из N квантовых точек и имеет величину $n_1(0) = n_0$. Временная эволюция чисел заполнения может быть исследована с помощью уравнений движения для билинейных комбинаций операторов рождения/уничтожения электронов a_σ^+/a_σ и $b_{j\sigma}^+/b_{j\sigma}$ ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} b_{j\sigma}^+ b_{j'\sigma} &= G_{jj'}(t); a_\sigma^+ a_\sigma = G_{aa}(t) \\ b_{j\sigma}^+ a_\sigma &= G_{ja}(t); a_\sigma^+ b_{j\sigma} = G_{aj}(t) \end{aligned} \quad (6.6)$$

Система уравнений для функций Грина $G_{jj'}(t)$, $G_{aj}(t)$, $G_{ja}(t)$ и $G_{aa}(t)$ описывает релаксацию заряда в рассматриваемой системе:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{jj'}(t) &= T \cdot G_{ja}(t) - T \cdot G_{aj'}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} G_{aa}(t) &= \sum_{j'} (T \cdot G_{aj'}(t) - T \cdot G_{j'a}(t)) - i2\gamma \cdot G_{aa}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} G_{aj}(t) &= -\Delta \cdot G_{aj}(t) + T \cdot G_{aa}(t) - \sum_{j'} T \cdot G_{j'j}(t) - i\gamma \cdot G_{aj}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} G_{ja}(t) &= \Delta \cdot G_{ja}(t) - T \cdot G_{aa}(t) + \sum_{j'} T \cdot G_{jj'}(t) - i\gamma \cdot G_{ja}(t) \end{aligned} \quad (6.7)$$

где $\Delta = \varepsilon - \varepsilon_0$ - расстройка между уровнями энергии в квантовых точ-

ках. Систему дифференциальных уравнений (6.7) можно записать в компактной матричной форме:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \widehat{G} = [\widehat{G}, \widehat{A}] - i(\widehat{B}\widehat{G} + \widehat{G}\widehat{B}) \quad (6.8)$$

где \widehat{G} - матрица парных корреляторов:

$$\widehat{G} = \begin{pmatrix} G_{aa} & G_{a1} & \dots & G_{aN} \\ G_{1a} & \dots & \dots & G_{1N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{Na} & G_{N1} & \dots & G_{NN} \end{pmatrix} \quad (6.9)$$

а матрица \widehat{A} имеет вид:

$$\widehat{A} = \begin{pmatrix} \Delta & T_1 & \dots & T_N \\ T_1^* & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \dots & 0 \\ T_N^* & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

Матрица \widehat{B} , описывающая переходы в состояния непрерывного спектра резервуара, имеет только один ненулевой элемент $\|B\|_{11} = \gamma$. Формальное решение системы уравнений (6.8) можно записать с помощью оператора эволюции:

$$\widehat{G}(t) = e^{[-\widehat{B}t + i\widehat{A}t]} \widehat{G}(0) e^{[\widehat{B}t - i\widehat{A}t]} \quad (6.11)$$

Временная эволюция средних чисел заполнения в квантовых точках, взаимодействующих с центральной точкой, может быть найдена с помощью выражения:

$$\langle n_j(t) \rangle = \widehat{G}_{jj}(t) = \sum_{a,b} [e^{-\widehat{B}t + i\widehat{A}t}]_{ja} \widehat{G}_{ab}(0) [e^{\widehat{B}t - i\widehat{A}t}]_{bj} \quad (6.12)$$

Поскольку в начальный момент времени весь заряд в системе локализован только в одной квантовой точке с номером j , то выполнены следующие начальные условия: $\langle n_{j\sigma}(0) \rangle = G_{jj}(0) = n_0$, $\langle n_{a\sigma}(0) \rangle = 0$, $\langle n_{j'\sigma}(0) \rangle = 0$, if $j \neq j'$ и также $G_{jj'}(0) = G_{aj}(0) = G_{ja}(0) = 0$.

Будем исследовать временную эволюцию чисел заполнения в квантовой точке с начальным зарядом и в центральной квантовой точке. С учетом начальных условий для чисел заполнения первоначально заряженной точки и для чисел заполнения точки, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра, можно получить следующие выражения для временной эволюции:

$$\begin{aligned} n_{j\sigma}(t) &= [e^{i\widehat{H}t}]_{jj} n_{0j} [e^{-i\widehat{H}t}]_{jj} \\ n_{a\sigma}(t) &= [e^{i\widehat{H}t}]_{aj} n_{0j} [e^{-i\widehat{H}t}]_{ja} \end{aligned} \quad (6.13)$$

где использованы обозначения $\widehat{H} = \widehat{A} + i\widehat{B}$ и $\widehat{\widetilde{H}} = \widehat{A} - i\widehat{B}$. Дальнейший анализ требует вычисления элементов матричных экспонент. Это можно сделать, используя рекуррентные соотношения аналогично процедуре, предложенной Каммингсом [295]. Для элементов оператора \widehat{H} выполнены соотношения:

$$\begin{aligned} (\widehat{H}^n)_{jj} &= \widehat{H}_{ja} (\widehat{H}^{n-1})_{aj} \\ (\widehat{H}^n)_{aj} &= \sum_{j'} \widehat{H}_{aj'} (\widehat{H}^{n-1})_{j'j} + \widehat{H}_{aa} (\widehat{H}^{n-1})_{aj} \\ (\widehat{H}^n)_{jj'} &= T_{j'}^* (\widehat{H}^{n-1})_{aj} \end{aligned} \quad (6.14)$$

Система уравнений (6.14) позволяет получить рекуррентное соотношение для матричных элементов $(\widehat{H}^n)_{aj}$:

$$(\widehat{H}^n)_{aj} = (\Delta + i\gamma) (\widehat{H}^{n-1})_{aj} + N|T|^2 (\widehat{H}^{n-2})_{aj} \quad (6.15)$$

Аналогичным образом записываются выражения для матричных элементов $(\widehat{\widetilde{H}}^n)_{aj}$. Тогда после проведения вычислений получим следующие выражения:

$$\begin{aligned} (\widehat{H}^n)_{aj} &= \frac{T_j}{2\sqrt{D}} (a^n + b^n) \\ (\widehat{\widetilde{H}}^n)_{aj} &= \frac{T_j^*}{2\sqrt{\widetilde{D}}} (\tilde{a}^n + \tilde{b}^n) \end{aligned} \quad (6.16)$$

где коэффициенты $D, \widetilde{D}, a, \tilde{a}, b$ и \tilde{b} определены соотношениями:

$$\begin{aligned}
D &= \sqrt{\frac{(\Delta + i\gamma)^2}{4} + N|T|^2} \\
\tilde{D} &= \sqrt{\frac{(\Delta - i\gamma)^2}{4} + N|T|^2} \\
a &= \frac{\Delta + i\gamma}{2} + D; \tilde{a} = \frac{\Delta - i\gamma}{2} + \tilde{D} \\
b &= \frac{\Delta + i\gamma}{2} - D; \tilde{b} = \frac{\Delta - i\gamma}{2} - \tilde{D}
\end{aligned} \tag{6.17}$$

Разлагая экспоненты в выражениях (6.13) в ряд по степеням \widehat{H} и $\widehat{\tilde{H}}$ и подставляя в соответствующее разложение выражения (6.16), используя обозначения (6.17), получим:

$$\begin{aligned}
[e^{i\widehat{H}t}]_{jj} &= \frac{|T|^2}{2D} \cdot \left[\frac{e^{iat}}{a} - \frac{e^{ibt}}{b} - \left(\frac{1}{a} - \frac{1}{b} \right) \right] + 1 \\
e^{[-i\widehat{\tilde{H}}t]_{jj}} &= \frac{|T|^2}{2\tilde{D}} \cdot \left[\frac{e^{-i\tilde{a}t}}{\tilde{a}} - \frac{e^{-i\tilde{b}t}}{\tilde{b}} - \left(\frac{1}{\tilde{a}} - \frac{1}{\tilde{b}} \right) \right] + 1
\end{aligned} \tag{6.18}$$

При выводе выражений (6.18) учтены начальные условия. Подставляя выражения (6.18) в уравнения (6.13), получим выражения (6.19), описывающие релаксацию заряда в центральной квантовой точке $n_a(t)$ и в квантовой точке с начальным зарядом $n_j(t)$ в случае, когда в рассматриваемой системе не учитывается кулоновское взаимодействие локализованных электронов.

$$\begin{aligned}
n_{a\sigma}(t) &= \frac{T^2}{4D\tilde{D}} \cdot (e^{iat} - e^{ibt}) \cdot (e^{-i\tilde{a}t} - e^{-i\tilde{b}t}) \\
n_{j\sigma}(t) &= n_{0j} \cdot \left[1 - \frac{1}{N} + \frac{|T|^2}{2D} \left(\frac{e^{iat}}{a} - \frac{e^{ibt}}{b} \right) \right] \cdot \\
&\quad \cdot \left[1 - \frac{1}{N} + \frac{|T|^2}{2\tilde{D}} \left(\frac{e^{-i\tilde{a}t}}{\tilde{a}} - \frac{e^{-i\tilde{b}t}}{\tilde{b}} \right) \right]
\end{aligned} \tag{6.19}$$

Очевидно, что с ростом числа квантовых точек N , начальный заряд n_{0j} остается практически полностью локализованным в исходной квантовой точке, даже несмотря на наличие в системе релаксации в состоянии непрерывного спектра резервуара. На больших временах величина заряда в начальной квантовой точке $n_j(t)$ определяется только начальными условиями и числом точек в системе:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} n_{j\sigma}(t) = n_{0j} \left(1 - \frac{1}{N}\right)^2 \quad (6.20)$$

В начальный момент времени весь заряд в системе может быть локализован не в одной из планарных квантовых точек, а в центральной квантовой точке, взаимодействующей с резервуаром. Тогда систему уравнений (6.7) необходимо решать с другими начальными условиями: $\langle n_{j\sigma}(0) \rangle = 0$, $\langle n_{a\sigma}(0) \rangle = G_{aa}(0) = n_0$, $\langle n_{j'\sigma}(0) \rangle = 0$. Временная эволюция заряда в центральной квантовой точке $n_{a\sigma}(t)$ и одной из точек окружения $n_{j\sigma}(t)$ описывается выражениями:

$$\begin{aligned} n_{a\sigma}(t) &= [e^{i\hat{H}t}]_{aa} n_{0a} [e^{-i\hat{H}t}]_{aa} \\ n_{j\sigma}(t) &= [e^{i\hat{H}t}]_{ja} n_{0a} [e^{-i\hat{H}t}]_{aj} \end{aligned} \quad (6.21)$$

Явный вид функции $\psi = [e^{i\hat{H}t}]_{aa}$ можно получить из дифференциального уравнения:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = i(\Delta + i\gamma) \cdot \psi + NT \cdot [e^{i\hat{H}t}]_{ja} \quad (6.22)$$

тогда:

$$\begin{aligned} \psi &= e^{i(\Delta+i\gamma)t} + \int_0^t NT \cdot e^{i(\Delta+i\gamma)(t-t_1)} e^{[i\hat{H}t_1]_{ja}} dt_1 \\ \psi &= \frac{NT^2}{2D} \left(\frac{e^{iat} - e^{i(\Delta+i\gamma)t}}{a - (\Delta + i\gamma)} - \frac{e^{ibt} - e^{i(\Delta+i\gamma)t}}{b - (\Delta + i\gamma)} \right) \end{aligned} \quad (6.23)$$

где коэффициенты a , b и D определены выражениями (6.17). Следовательно, если начальный заряд локализован в центральной квантовой точке, пленения заряда в системе не происходит.

Для правильного описания электронного транспорта в квантовых точках нанометрового размера необходимо учесть влияние кулоновского взаимодействия локализованных электронов на релаксацию зарядовой плотности в системе. В этом случае необходимо учесть следующее слагаемое, входящее в исходный гамильтониан системы (6.5):

$$H_{int} = U_{(0)} n_{\alpha\sigma} n_{\alpha-\sigma} \quad (6.24)$$

где индекс $\alpha = a(j)$ и величина кулоновского взаимодействия $U_{(0)}$ в центральной квантовой точке (в планарных точках, взаимодействующих с центральной). Учет кулоновского взаимодействия проведем с использованием приближения среднего поля. Тогда необходимо заменить значение энергии уровня в квантовой точке ε на величину $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon + U < n_{\alpha\sigma}(t) >$ в конечных выражениях для временной эволюции чисел заполнения $n_{\alpha\sigma}$ (6.19).

Таким образом, необходимо решать самосогласованную систему уравнений. Система уравнений для функций $G_{jj'}(t)$, $G_{aa}(t)$, $G_{ja}(t)$ и $G_{aj}(t)$ примет вид:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} G_{jj'}(t) &= -iT_{j'}G_{ja}(t) + iT_j^*G_{aj'}(t) - iU_0(G_{j'j'}(t) - G_{jj})G_{jj'}(t) \\
\frac{\partial}{\partial t} G_{aa}(t) &= -i\sum_{j'}(T_{j'}^*G_{aj'}(t) - T_{j'}G_{j'a}(t)) - 2\gamma G_{aa}(t) \\
\frac{\partial}{\partial t} G_{aj}(t) &= i\Delta G_{aj}(t) - iT_jG_{aa}(t) + i\sum_{j'}T_{j'}G_{j'j}(t) - \\
&\quad - iU_0G_{jj}(t)G_{aj}(t) - \gamma G_{aj}(t) \\
\frac{\partial}{\partial t} G_{ja}(t) &= -i\Delta G_{ja}(t) + iT_j^*G_{aa}(t) - i\sum_{j'}T_{j'}^*G_{jj'}(t) + \\
&\quad + iU_0G_{jj}(t)G_{ja}(t) - \gamma G_{ja}(t)
\end{aligned} \tag{6.25}$$

где $\Delta = \varepsilon - \varepsilon_0$ и $\gamma = \pi\nu_k T_k^2$.

При наличии кулоновского взаимодействия система дифференциальных уравнений, описывающих динамику чисел заполнения, может быть записана в компактном виде:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\widehat{G} = [\widehat{G}, \widehat{A} + \widehat{C}] + i(\widehat{\Gamma}\widehat{G} + \widehat{G}\widehat{\Gamma}) \tag{6.26}$$

где матрицы \widehat{A} , \widehat{G} определяются выражениями (6.9) и (6.10) соответственно, а матрицы $\widehat{\Gamma}$ и \widehat{C} можно записать в виде $\|\Gamma\|_{ij} = \delta_{i1}\delta_{j1}\gamma$ и $\|C\|_{ij} = \delta_{ij}U_0G_{jj}$.

Формальное решение системы уравнений для парных корреляторов (6.26) запишем с помощью оператора эволюции:

$$\widehat{G}(t) = T e^{[i\int_0^t(\widehat{A}(t')+\widehat{C}(t'))dt']} \cdot \widehat{G}(0) T \cdot e^{[-i\int_0^t(\widehat{A}(t')+\widehat{C}(t'))dt']} \tag{6.27}$$

Если в начальный момент весь заряд находится в точке с номером j , то выполнены начальные условия: $n_i(0) = n_{j0}\delta_{ij}$, $n_a(0) = 0$, и можно получить следующие выражения для функций Грина:

$$\begin{aligned} G_{j'j'}(t) &= \sum_{k,k'} \Omega_{j'k}^{-1} G_{kk'}(0) \Omega_{k'j'} = n_{0j} |\Omega_{jj'}|^2 \\ G_{aa}(t) &= n_{0j} |\Omega_{aj}|^2 \end{aligned} \quad (6.28)$$

где $\Omega = T \exp[-i \int_0^t (\widehat{A}(t') + \widehat{C}(t')) dt']$ - оператор эволюции.

Введем обозначение:

$$X_{ab}^n = \left[\int_0^t dt_1 (\widehat{A}(t_1) + \widehat{C}(t_1)) \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{n-1}} (\widehat{A}(t_n) + \widehat{C}(t_n)) \right]_{ab} \quad (6.29)$$

При этом

$$\begin{aligned} \Omega_{jj}(t) &= n \sum_n i^n X_{jj}^n \\ \Omega_{aj}(t) &= n \sum_n i^n X_{aj}^n \end{aligned} \quad (6.30)$$

Записав явный вид матриц \widehat{A} и \widehat{C} , получим следующие соотношения:

$$\begin{aligned} X_{aj}^n(t) &= \Delta \int_0^t dt_1 X_{aj}^{n-1}(t_1) + \sum_{j'} T \int_0^t dt_1 X_{jj}^{n-1}(t_1) \\ X_{jj}^n(t) &= T \int_0^t dt_1 X_{aj}^{n-1}(t_1) + U_0 \int_0^t dt_1 G_{j'j'}(t_1) X_{j'j}^{n-1}(t_1) \end{aligned} \quad (6.31)$$

С учетом выражений (6.28), (6.29) и начальных условий получаем уравнения для матричных элементов оператора эволюции Ω :

$$\begin{aligned} \dot{\Omega}_{aj} &= i\Delta \Omega_{aj} + i \sum_{j'} T \Omega_{j'j} \\ \dot{\Omega}_{j'j} &= iT \Omega_{aj} + iU_0 n_{0j} |\Omega_{j'j}|^2 \Omega_{j'j} \end{aligned} \quad (6.32)$$

с начальными условиями $\Omega_{aj}(0) = 0$, $\Omega_{jj}(0) = 1$, $\Omega_{j'j}(0) = 0$.

В системе с большим числом квантовых точек можно пренебречь кулоновским взаимодействием локализованных электронов в изначально пустых точках, поскольку амплитуда чисел заполнения в этих точках пропорциональна величине $1/N^2$. Следовательно, учитывая кулоновские корреляции только в точке с начальным зарядом, можно записать систему уравнений (6.32) в более простом виде:

$$\begin{aligned}
\ddot{\Omega}_{aj} &= -(N-1)T^2 \cdot \Omega_{aj} + i(\Delta - \gamma) \cdot \dot{\Omega}_{aj} + iT \cdot \dot{\Omega}_{jj} \\
\dot{\Omega}_{jj} &= iT \cdot \Omega_{aj} + iU_0 n_{0j} \cdot |\Omega_{jj}|^2 \Omega_{jj}
\end{aligned}
\tag{6.33}$$

Численное решение системы уравнений (6.33) позволяет анализировать процессы релаксации заряда в системе квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия.

Эволюция чисел заполнения в точке с начальным зарядом $n_j(t)$ и в центральной квантовой точке $n_a(t)$, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра, для случая нерезонансного туннелирования между уровнями энергии точек ($(\varepsilon - \varepsilon_0)/\gamma = -1$) в отсутствие кулоновского взаимодействия представлена на рисунке 6.14. С ростом числа квантовых точек N происходит принципиальное изменение процесса релаксации заряда. Заряд, локализованный в начальный момент времени в одной из N квантовых точек, остается захваченным в ней, несмотря на наличие в системе релаксации в состоянии непрерывного спектра резервуара. Если система состоит из трех точек ($N = 2$), только двадцать процентов начального заряда остается локализованным в исходной квантовой точке (рис.6.14а). В системе из шести квантовых точек ($N = 5$) происходит локализация уже более шестидесяти процентов начального заряда (рис.6.14а).

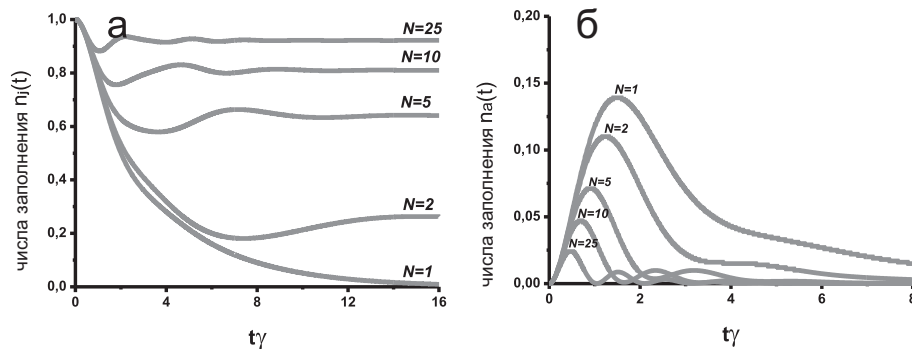


Рис. 6.14. Временная эволюция чисел заполнения в первой а). и во второй б). квантовых точках в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии $((\varepsilon - \varepsilon_0)/\gamma = -1, 0)$ для различного числа точек в системе. Параметры $T/\gamma = 0,6$ и $\gamma = 1,0$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

Обнаруженный эффект можно назвать "пленением" заряда в системе квантовых точек, а саму систему можно рассматривать как "зарядовую ловушку". Увеличение числа квантовых точек в системе приводит к уменьшению амплитуды заряда в центральной точке $n_a(t)$ для фиксированного

значения отношения T/γ из-за эффективного увеличения туннельной связи между каждой из N планарных точек и центральной точкой (рис. 6.14б). Процесс релаксации также зависит от величины расстройки между уровнями энергии в квантовых точках. Заряд в возбужденной точке быстрее выходит на стационарное значение при малой расстройке между уровнями энергии в центральной квантовой точке и в планарных квантовых точках.

Рассмотрим теперь влияние кулоновского взаимодействия на временную эволюцию заряда. Сначала исследуем случай, когда кулоновское взаимодействие между локализованными электронами учтено только в центральной квантовой точке. При этом в начальный момент времени заряд в центральной точке отсутствует. Результаты расчетов для разного положения уровней энергии представлены на рисунке 6.15. Полученные зависимости демонстрируют, что как и в случае отсутствия кулоновского взаимодействия, в системе происходит "пленение" заряда.

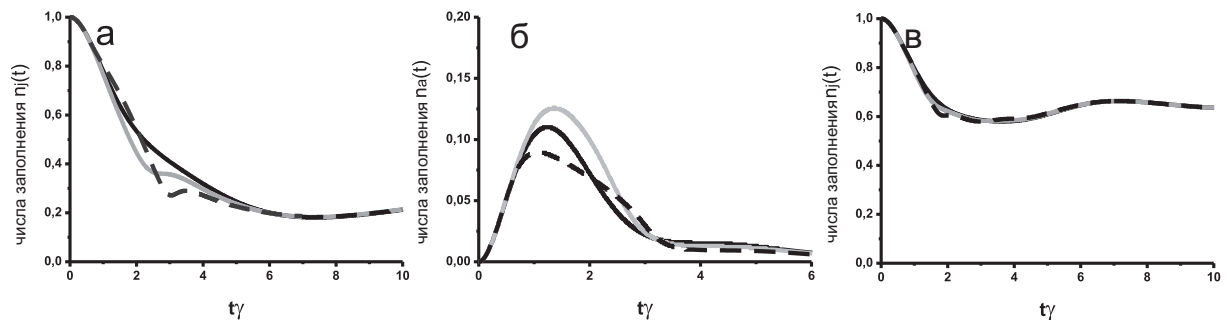


Рис. 6.15. Временная эволюция чисел заполнения в точке с начальным зарядом а). и в центральной квантовой точке б). в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии $(\varepsilon - \varepsilon_0)/\gamma = -1, 0$ для различного числа точек в системе. а). б). $N = 2$, в). $N = 5$. Кулоновское взаимодействие учтено только в центральной квантовой точке: $U/\gamma = 0, 0$ - черная кривая, $U/\gamma = 10, 0$ - серая кривая, $U/\gamma = 30, 0$ - черная пунктирная кривая. Параметры $T/\gamma = 0, 6$ и $\gamma = 1, 0$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

В случае отрицательной расстройки между уровнями энергии (уровень энергии в центральной точке лежит ниже, чем уровень энергии в окружающих точках) кулоновские корреляции приводят к компенсации отрицательной расстройки (в системе существует критическое значение параметра U/γ , при котором происходит полная компенсация расстройки, значение параметра определяется конфигурацией системы). При дальнейшем увеличении кулоновского взаимодействия происходит смена знака эффективной расстройки между уровнями энергии для определенных моментов времени, зависящих от величины кулоновского взаимодействия, и расстройка между уровнями становится положительной. Поэтому частота осцилляций заряда

на первом этапе релаксации уменьшается, что соответствует уменьшению отрицательной расстройки, а далее возрастает из-за роста положительной расстройки. С ростом числа квантовых точек величина параметра U/γ , при которой происходит полная компенсация расстройки, возрастает.

Кулоновское взаимодействие приводит к формированию нескольких временных интервалов с существенно различными характерными скоростями релаксации. С ростом величины кулоновского взаимодействия скорость релаксации заряда в первой точке на начальном этапе возрастает, а далее уменьшается по сравнению со скоростью релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия (рис.6.15а).

Рост числа квантовых точек приводит к эффективному увеличению туннельной амплитуды в системе, что вызывает подавление кулоновских корреляций. Чем меньше число точек, тем сильнее сказывается влияние кулоновских корреляций на процесс релаксации заряда (рис.6.15а,в).

Наиболее сильно влияние кулоновского взаимодействия на временную эволюцию заряда должно проявляться в случае, когда кулоновское взаимодействие учтено в квантовой точке, в которой в начальный момент локализован заряд. Исследуем процессы релаксации заряда в системе квантовых точек для случая, когда кулоновское взаимодействие между локализованными электронами учтено в каждой из точек, связанных с центральной точкой. Начальный заряд при этом помещен в одной из N точек с кулоновским взаимодействием. Результаты расчетов представлены на рисунке 6.16.

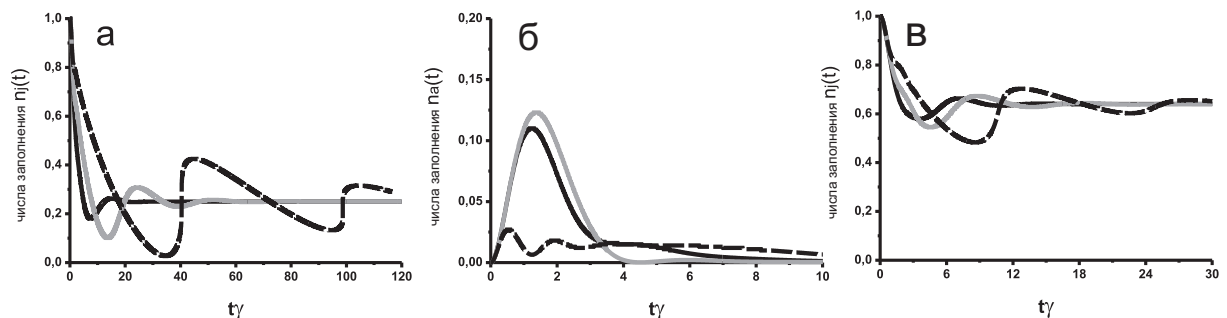


Рис. 6.16. Временная эволюция чисел заполнения в точке с начальным зарядом а). и в центральной квантовой точке б). в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии $((\varepsilon - \varepsilon_0)/\gamma = -1, 0)$ для различного числа точек в системе. а).б). $N = 2$, в). $N = 5$. Кулоновское взаимодействие учтено только в квантовой точке с начальным зарядом: $U/\gamma = 0$, 0- черная кривая, $U/\gamma = 2$, 0- серая кривая, $U/\gamma = 7$, 0- черная пунктирная кривая. Параметры $T/\gamma = 0, 6$ и $\gamma = 1, 0$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

Полученные зависимости демонстрируют, что как и в случае отсут-

ствия кулоновского взаимодействия или его наличия в центральной точке, в системе происходит "пленение" заряда. С ростом числа точек эффективно возрастает величина туннельной связи между точками, что приводит к подавлению кулоновских корреляций (аналогично ситуации, когда кулоновское взаимодействие учтено в центральной точке). При этом кулоновское взаимодействие влияет на релаксацию заряда значительно сильнее, чем в случае учета корреляций в центральной квантовой точке (заметные изменения в релаксации по сравнению с релаксацией без учета кулоновского взаимодействия проявляются при меньших значениях отношения U/γ).

Чем меньше число квантовых точек в системе, тем сильнее сказывается влияние кулоновского взаимодействия на процесс релаксации заряда. Рост числа точек также приводит к уменьшению периода осцилляций во временной эволюции заряда для каждой из точек. Наличие кулоновского взаимодействия в точке с начальным зарядом приводит к формированию в системе дополнительных осцилляций, вызванных модуляцией расстройки между уровнями энергии. Частота осцилляций возрастает с ростом числа точек.

В случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии (уровень энергии в центральной квантовой лежит ниже, чем уровень энергии в окружающих ямах) кулоновское взаимодействие приводит к компенсации отрицательной расстройки (в системе существует критическое значение параметра U/γ при котором происходит полная компенсация расстройки, значение параметра определяется конфигурацией системы). При дальнейшем увеличении кулоновского взаимодействия происходит смена знака расстройки между уровнями энергии, и расстройка между уровнями становится положительной. Поэтому частота осцилляций заряда сначала уменьшается (рис.6.16а), что соответствует уменьшению отрицательной расстройки, а далее увеличивается, что соответствует положительной расстройке (рис.6.16а). С ростом числа точек величина параметра U/γ , при котором происходит полная компенсация начальной расстройки, возрастает.

С ростом кулоновского взаимодействия уменьшается доля заряда, перекачиваемого в центральную точку, а скорость релаксации заряда в квантовой точке с начальным зарядом сначала возрастает, а при дальнейшем росте величины кулоновского взаимодействия - уменьшается (происходит компенсация расстройки с последующей сменой знака расстройки).

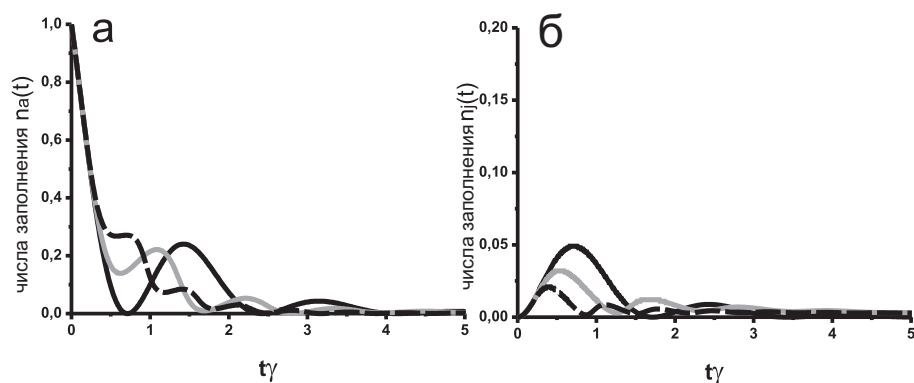


Рис. 6.17. Временная эволюция чисел заполнения а). в центральной квантовой точке с начальным зарядом б). в одной из планарных точек, взаимодействующей с центральной случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии $((\varepsilon - \varepsilon_0)/\gamma = -1, 0)$ для $N = 5$ точек в системе. Кулоновское взаимодействие учтено только в квантовой точке с начальным зарядом: $U/\gamma = 0, 0$ - черная кривая, $U/\gamma = 4, 0$ - серая кривая, $U/\gamma = 12, 0$ - черная пунктирная кривая. Параметры $T/\gamma = 0, 6$ и $\gamma = 1, 0$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

На рисунке **6.17** представлены результаты расчета временной эволюции чисел заполнения в случае, когда весь заряд в системе в начальный момент времени локализован в центральной квантовой точке, взаимодействующей с состояниями непрерывного спектра. В этом случае ”пленения заряда” не наблюдается как в отсутствие, так и при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов в квантовых точках. Роль кулоновских корреляций сводится к замедлению скорости релаксации.

Таким образом, исследованы особенности релаксации заряда в системе, состоящей из произвольного числа квантовых точек с кулоновским взаимодействием, связанной с состояниями непрерывного спектра резервуара. Впервые показана возможность ”пленения” заряда в такой системе и продемонстрировано подавление кулоновского взаимодействия во временной эволюции заряда с ростом числа точек. Полученные результаты являются актуальными в связи с необходимостью осуществления контролируемой локализации заряда в структурах сверхмалых размеров, что позволит не только исследовать фундаментальные особенности электронного транспорта в системах нанометровых размеров, но и использовать эффект пленения заряда для кодировки квантовых битов, используя спин одиночного электрона, локализованного в квантовой точке.

§ 6.4. Особенности релаксации заряда в связанных квантовых точках, вызванные наличием электрон-фононного взаимодействия

Для полного описания нестационарных эффектов в связанных квантовых точках помимо кулоновского взаимодействия локализованных электронов необходимо учитывать электрон-фононное взаимодействие, которое приводит к появлению дополнительных неупругих каналов для релаксации заряда, что сказывается на появлении новых особенностей в электронном транспорте [258–262, 296]. Однако, основная часть теоретических работ по исследованию проблемы электронного транспорта в системах связанных квантовых точек при наличии электрон-фононного взаимодействия посвящена анализу туннельного тока и токовых корреляций (низкочастотный шум) [24, 256]. Только в нескольких работах были сделаны попытки проанализировать релаксацию заряда в присутствии электрон-фононного взаимодействия в системе [263–266]. Основным результатом работ является вывод о том, что время жизни возбужденного состояния в квантовых точках во многом определяется рассеянием на акустических фононных частотах. При этом вопрос о роли оптических фононов не рассматривался.

Рассмотрим временную эволюцию зарядовой плотности в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии электрон-фононного взаимодействия [291]. Фононы всегда присутствуют в таких системах и значительным образом изменяют их туннельные характеристики. Типичные значения частот оптических фононов составляют 50 – 200 мВ. В зависимости от размера квантовых точек и геометрии системы частота оптических фононов может быть как больше, так и меньше величины связи между точками, расстройки между уровнями энергии и скорости релаксации в состоянии непрерывного спектра. Анализ роли электрон-фононного взаимодействия в процессе релаксации зарядовой плотности проведем с использованием диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов [67].

Рассмотрим систему из двух связанных квантовых точек с одноэлектронными уровнями энергии ε_1 и ε_2 , взаимодействующую с состояниями непрерывного спектра. Исследуем случай, когда в начальный момент времени два электрона с противоположными спинами локализованы на уровне энергии ε_1 ($n_{1\sigma}(0) = n_0 = 1$). Квантовая точка с уровнем энергии ε_2 (вто-

рая квантовая точка) взаимодействует с состояниями непрерывного спектра резервуара (ε_p). Релаксацию заряда можно описать гамильтонианом:

$$\hat{H} = \hat{H}_D + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{res} \quad (6.34)$$

Гамильтониан \hat{H}_D

$$\begin{aligned} \hat{H}_D = & \sum_{i=1,2\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{\sigma} T(c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{1\sigma} c_{2\sigma}^+) + \\ & + \omega_0 b^+ b + g(c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{1\sigma} c_{2\sigma}^+)(b^+ + b) \end{aligned} \quad (6.35)$$

описывает локализованные в квантовых точках состояния с уровнями энергии ε_i , вырожденные по спину (индексы $i = 1$ и $i = 2$ отвечают первой и второй квантовой точкам), и электрон-фононное взаимодействие. Операторы $c_{i\sigma}^+/c_{i\sigma}$ описывают рождение/уничтожение электронов со спином $\sigma = \pm 1/2$ на уровнях энергии квантовых точек, n_{σ} - соответствующий оператор электронных чисел заполнения. Операторы b^+/b соответствуют рождению/уничтожению фононов. ω_0 - оптическая фононная частота, g - константа электрон-фононного взаимодействия. Амплитуда туннельных переходов между квантовыми точками T - не зависит от импульса и спина.

Взаимодействие между второй квантовой точкой и состояниями непрерывного спектра резервуара описывается гамильтонианом:

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{p\sigma} t(c_{p\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{p\sigma} c_{2\sigma}^+), \quad (6.36)$$

где t - амплитуда туннельных переходов в состояния непрерывного спектра, не зависящая от спина и импульса. Полагая плотность состояний непрерывного спектра ν_0 постоянной величиной, определим скорость релаксации γ следующим образом $\gamma = \pi\nu_0 t^2$.

Гамильтониан, описывающий состояния непрерывного спектра, имеет вид:

$$\hat{H}_{res} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma}, \quad (6.37)$$

где операторы $c_{p\sigma}^+/c_{p\sigma}$ соответствуют рождению/уничтожению электрона со спином σ и импульсом p в резервуаре.

Временная эволюция электронной плотности состояний определяется келдышевской функцией Грина $G_{11}^<(t, t')$, которая связана с электронными числами заполнения локализованного состояния:

$$G_{11}^<(t, t) = in_1(t) \quad (6.38)$$

Интегро-дифференциальное уравнение для функции $G_{11}^{<T}(t, t')$ без учета электрон-фононного взаимодействия имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{11}^{<T}(t, t') &= G_{11}^{0<} + G_{11}^{0R}T^2G_{22}^{0R}G_{11}^{<} + \\ &+ G_{11}^{0R}T^2G_{22}^{0<}G_{11}^{AT} + G_{11}^{0<}T^2G_{22}^{0A}G_{11}^{AT} \end{aligned} \quad (6.39)$$

Для случая, когда весь заряд в начальный момент локализован в первой квантовой точке, а вторая точка оказывается пустой, третьим слагаемым в уравнении (6.39) можно пренебречь. Запаздывающая функция Грина $G_{11}^{AT}(t', t) = [G_{11}^{RT}(t, t')]^*$ определяет плотность состояний в первой квантовой точке и может быть точно найдена из интегрального уравнения:

$$G_{11}^{RT} = G_{11}^{0R} + G_{11}^{0R}T^2G_{22}^{0R}G_{11}^R \quad (6.40)$$

где функции $G_{11}^{0R}(t - t')$ и $G_{22}^{0R}(t - t')$ в отсутствие взаимодействия между точками определяются выражениями:

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R}(t - t') &= -i\Theta(t - t')e^{-i\varepsilon_1(t-t')} \\ G_{22}^{0R}(t - t') &= -i\Theta(t - t')e^{-i\varepsilon_2(t-t') - \gamma(t-t')} \end{aligned} \quad (6.41)$$

Собственные значения $E_{1,2}$ уравнения (6.40) имеют вид:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - i\gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + i\gamma)^2 + 4T^2} \quad (6.42)$$

Тогда запаздывающая функция Грина может быть записана в виде:

$$\begin{aligned} G_{11}^{RT}(t, t') &= -i\Theta(t - t') \left(\frac{E_1 - \varepsilon_2 + i\gamma}{E_1 - E_2} e^{-iE_1(t-t')} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{E_2 - \varepsilon_2 + i\gamma}{E_1 - E_2} e^{-iE_2(t-t')} \right) \end{aligned} \quad (6.43)$$

Взаимодействие с состояниями непрерывного спектра включено в функцию Грина $G_{22}^{0R}(t-t')$. Учет электрон-фоонного взаимодействия приводит к появлению поправок к функции Грина G_{11}^{RT} в уравнениях (6.39) и (6.40). Следовательно, уравнение для функции Грина имеет вид:

$$G_{11}^R(t, t') = G_{11}^{0R} + G_{11}^{0R} T^2 G_{22}^{0R} G_{11}^R + G_{11}^{0R} \Sigma_{11}^R G_{11}^R + \\ + G_{11}^{0R} \Sigma_{12}^R G_{21}^R + G_{12}^{0R} \Sigma_{21}^R G_{11}^R + G_{12}^{0R} \Sigma_{22}^R G_{21}^R \quad (6.44)$$

где собственно-энергетические части $\Sigma_{11}^R(t, t')$, $\Sigma_{12}^R(t, t')$, $\Sigma_{21}^R(t, t')$ и $\Sigma_{22}^R(t, t')$:

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}^R(t, t') &= ig^2 [D^> G_{22}^{AT} + D^R G_{22}^{<T}] \\ \Sigma_{12}^R(t, t') &= ig^2 [D^> G_{21}^{AT} + D^R G_{21}^{<T}] \\ \Sigma_{21}^R(t, t') &= ig^2 [D^> G_{12}^{AT} + D^R G_{12}^{<T}] \\ \Sigma_{22}^R(t, t') &= ig^2 [D^> G_{11}^{AT} + D^R G_{11}^{<T}] \end{aligned} \quad (6.45)$$

В выражениях (6.45) выполнены следующие соотношения между функциями Грина $G_{22}^{AT}(t', t) = [G_{22}^{RT}(t, t')]^*$, а выражение для функции $G_{22}^{RT}(t, t')$ аналогично выражению (6.43):

$$G_{22}^{RT}(t, t') = -i\Theta(t-t') \left(\frac{E_2 - \varepsilon_1}{E_1 - E_2} e^{-E_1(t-t')} - \frac{E_1 - \varepsilon_1}{E_1 - E_2} e^{-E_2(t-t')} \right) \quad (6.46)$$

В выражениях (6.43) и (6.46) функции Грина G_{ij}^T получены для случая, когда взаимодействие между точками и взаимодействие с состояниями непрерывного спектра в отсутствие электрон-фоонного взаимодействия учтены точно. Эти функции входят в выражения (6.44) и (6.45) для величин Σ_{ij} . Все используемые функции Грина вычислены суммированием бесконечного ряда диаграмм. При этом функция G_{ij} имеет порядок малости T/γ по сравнению с диагональными функциями Грина. Три последних слагаемых в уравнении (6.44) имеют порядок малости $\frac{T^2}{\gamma^2}$ по сравнению с первыми тремя слагаемыми, поэтому ими можно пренебречь при дальнейших расчетах. Тогда релаксация заряда при наличии электрон-фоонного взаимодействия определяется в основном слагаемым $G_{11}^{0R} \Sigma_{11}^R G_{11}^R$. Уравнение (6.44) можно переписать в следующем виде:

$$(G_{11}^{0R-1} - T^2 G_{22}^{0R} - \Sigma_{11}^R) G_{11}^R(t, t') = \delta(t - t') \quad (6.47)$$

Собственные значения уравнения (6.47) можно найти из характеристического уравнения:

$$[G_{11}^{0R-1}(\omega) G_{22}^{0R-1}(\omega) - T^2] \cdot [G_{11}^{0R-1}(\omega - \omega_0) G_{22}^{0R-1}(\omega - \omega_0) - T^2] - g^2 \cdot (2N_{0\omega} + 1) \cdot G_{22}^{0R-1}(\omega) G_{11}^{0R-1}(\omega - \omega_0) = 0 \quad (6.48)$$

где $N_{0\omega}$ - равновесная функция распределения фононов, а функции G_{ii}^{0R-1} определяются выражениями:

$$G_{ii}^{0R-1} = i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_i \quad (6.49)$$

Следовательно, запаздывающая функция Грина G_{11}^R может быть записана в виде:

$$G_{11}^R(t, t') = \sum_i -i \Theta(t - t') A_i e^{-iE_i(t-t')} \quad (6.50)$$

где E_i - собственные значения уравнения (6.48). Коэффициенты A_i определены системой линейных уравнений в первом порядке теории возмущений по параметру g^2 :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 A_i &= 1 \\ - \sum_{i=1}^4 A_i \cdot \sum_{j \neq i} E_j &= -(E_3^0 + E_4^0 + \varepsilon_2 - i\gamma) \\ \sum_{i=1}^4 A_i \cdot \sum_{k \neq l \neq i} E_k \cdot E_l &= E_3^0 E_4^0 + (\varepsilon_2 - i\gamma)(E_3^0 + E_4^0) \\ \sum_{i=1}^4 A_i \cdot \prod_{j \neq i} E_j &= -(\varepsilon_2 - i\gamma) E_3^0 E_4^0 \end{aligned} \quad (6.51)$$

E_i^0 - собственные значения уравнения (6.48) с константой электрон-фононного взаимодействия равной $g = 0$.

$$\begin{aligned} E_{1,2}^0 &= E_{1,2} \\ E_{3,4}^0 &= \omega_0 + E_{1,2} \end{aligned} \quad (6.52)$$

Уравнение для келдышевской функции Грина $G_{11}^<(t, t')$, которая описывает временную эволюцию заряда $n_1(t)$, имеет вид:

$$\begin{aligned} G_{11}^<(t, t') &= G_{11}^{0<} + G_{11}^{0R} T^2 G_{22}^{0R} G_{11}^< + G_{11}^{0R} T^2 G_{22}^{0<} G_{11}^A + G_{11}^{0<} T^2 G_{22}^{0A} G_{11}^A + \\ &+ G_{11}^{0R} \Sigma_{11}^< G_{11}^A + G_{11}^{0R} \Sigma_{11}^R G_{11}^< + G_{11}^{0<} \Sigma_{11}^A G_{11}^A \end{aligned} \quad (6.53)$$

где $\Sigma_{11}^<(t, t')$ и $D^<(t_1, t_2)$ - собственная энергия и фононная функция Грина:

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}^<(t, t') &= ig^2 D^<(t, t') G_{22}^<(t, t') \\ D^<(t_1, t_2) &= -i(N_{\omega_0} + 1)e^{-i\omega_0(t_1-t_2)} - iN_{-\omega_0}e^{i\omega_0(t_1-t_2)} \end{aligned} \quad (6.54)$$

Действуя оператором G_{11}^{0R-1} на уравнение (6.53), запишем его в виде:

$$\begin{aligned} G_{11}^{0R-1} G_{11}^<(t, t') &= (i\frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_1) G_{11}^<(t, t') = T^2 \int_0^\infty dt_1 \cdot G_{22}^{0R}(t, t_1) G_{11}^<(t_1, t') + \\ &+ \int dt_1 [\Sigma_{11}^<(t, t_1) G_{11}^A(t_1, t') + \Sigma_{11}^R(t, t_1) G_{11}^<(t_1, t')] \end{aligned} \quad (6.55)$$

Функция Грина $G_{11}^<(t, t) = in_1(t)$ определена суммой однородного и неоднородного решений дифференциального уравнения:

$$n_1(t) = n_1^h(t) + \tilde{n}_1(t) = n_1^h(t) + \int_0^t G_{11}^R(t, t_1) \Sigma_{11}^<(t, t_2) G_{11}^A(t_2, t) dt_1 dt_2 \quad (6.56)$$

Однородное решение уравнения имеет вид:

$$n_1^h(t) = n_1^0 \cdot \sum_{ij} A_i A_j^* e^{-i(E_i - E_j^*)t} \quad (6.57)$$

Коэффициенты A_i соответствуют функции Грина G_{11}^R , которая определяется уравнением (6.50). Выражение для функции $G_{22}^{<T}(t_1, t_2)$ имеет вид:

$$G_{22}^{<T}(t_1, t_2) = \sum_{i'j'=1,2} a_{i'j'} e^{-iE_{i'}^0 t_1} \cdot e^{iE_{j'}^0 t_2} \quad (6.58)$$

где коэффициенты $a_{i'j'}$ можно записать в виде:

$$\begin{aligned} a_{11} &= a_{22} = \frac{iT^2}{|E_2^0 - E_1^0|^2} \\ a_{12} &= a_{21}^* = -a_{11} \end{aligned} \quad (6.59)$$

Тогда получим выражение, описывающее неоднородное решение уравнения (6.53):

$$\begin{aligned} \tilde{n}_1(t) &= g^2 \sum_{ij'i'j'=1}^4 A_i \cdot A_j^* \cdot a_{i'j'} \cdot \frac{-1}{i(E_j^* - E_{j'}^{0*} - \omega_0)} \cdot \frac{1}{i(E_i - E_i^0 - \omega_0)} \cdot \\ &\cdot [e^{-i(E_i^0 + \omega_0)t} - e^{-iE_i t}] [e^{i(E_{j'}^{0*} + \omega_0)t} - e^{iE_{j'}^* t}] \end{aligned} \quad (6.60)$$

Оставляя только ведущие члены в выражении (6.60) по параметрам $\frac{g^2}{\omega_0^2}$, $\frac{T^2}{\gamma^2}$, запишем неоднородное решение:

$$\tilde{n}_1(t) = \frac{g^2}{\omega_0^2} \cdot \frac{T^2}{\gamma^2} \sum_{i'j'=1}^2 [e^{-i(E_i^0 + \omega_0)t} - e^{-iE_i t}] \cdot [e^{i(E_{j'}^{0*} + \omega_0)t} - e^{iE_{j'}^* t}] \quad (6.61)$$

Для малых значений константы электрон-фононного взаимодействия ($\frac{g}{\omega_0} \ll 1$) релаксация заряда определяется однородным решением. Результаты расчета временной эволюции чисел заполнения в связанных квантовых точках при наличии электрон-фононного взаимодействия приведены на рис. **6.18-6.19**.

Временная эволюция чисел заполнения определяется параметрами исследуемой системы: расстройкой между уровнями энергии, соотношением между скоростями релаксации и константой электрон-фононного взаимодействия, значением оптической фононной частоты. Характерной особенностью релаксации заряда, обнаруженной в исследуемой системе в присутствии электрон-фононного взаимодействия, является увеличение скорости релаксации электронных чисел заполнения.

Рассмотрим сначала релаксацию заряда в случае положительной начальной расстройки между уровнями энергии в связанных квантовых точках ($\Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0$). Результаты расчетов представлены на рисунке **6.18**. В этом случае электрон-фононное взаимодействие приводит к увеличению

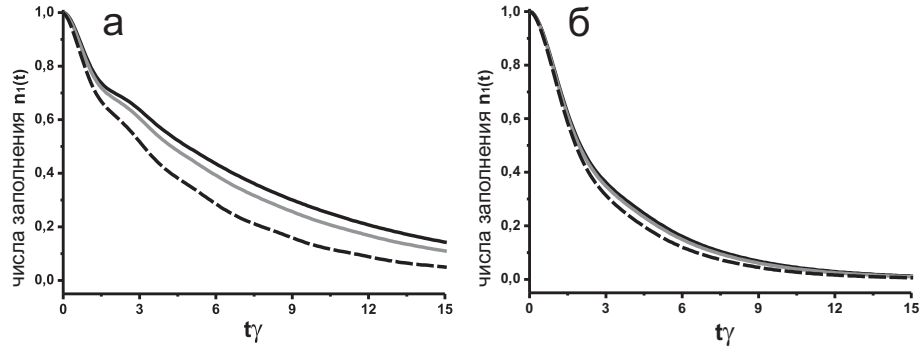


Рис. 6.18. Временная эволюция чисел заполнения в квантовой точке с начальным зарядом при наличии электрон-фононного взаимодействия в случае положительной начальной расстройки между уровнями энергии ($\Delta\varepsilon$). Черная кривая соответствует случаю при $g = 0$, серая кривая соответствует случаю при $g = 0, 1$, черная пунктирная линия соответствует случаю при $g = 0, 2$. а). $\Delta\varepsilon = 2, 0$, $\omega_0 = 2, 0$; б). $\Delta\varepsilon = 1, 0$, $\omega_0 = 1, 0$. Параметры $T = 0, 6$, $\gamma = 1, 0$ имеют одинаковые значения для всех графиков.

скорости релаксации заряда. Для фиксированного набора параметров системы рост константы электрон-фононного взаимодействия g приводит к увеличению скорости релаксации электронных чисел заполнения. Наиболее сильно влияние электрон-фононного взаимодействия на релаксацию заряда проявляется с увеличением начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках (рис.6.18а).

Существует критическое значение расстройки для каждого фиксированного набора параметров системы, которое соответствует смене режима релаксации. Для значений расстройки меньших критического релаксация происходит только с одной характерной скоростью как при наличии электрон-фононного взаимодействия (кривая серого цвета и пунктирная кривая черного цвета на рис.6.18б), так и в его отсутствии (кривая черного цвета на рис.6.18б). Характерный временной масштаб, определяющий релаксацию заряда, имеет значение близкое к величине $\gamma_{res} = 2\frac{T^2}{\gamma}$. Для значений расстройки, превышающих критическое, релаксация заряда происходит в два этапа с различными характерными скоростями релаксации (рис.6.18а). Скорость релаксации заряда на первом этапе ($t\gamma \leq 1, 5$) превосходит скорость релаксации на втором ($t\gamma \geq 1, 5$). Без учета электрон-фононного взаимодействия характерный временной масштаб, определяющий релаксацию заряда на первом этапе, имеет значение близкое к γ_{res} . На втором этапе временная эволюция происходит со скоростью релаксации очень близкой к величине $\gamma_{nonres} = \gamma_{res}\frac{\gamma^2}{\Delta\varepsilon^2}$. При учете электрон-фононного взаимодействия скорость релаксации электронных чисел заполнения имеет величину $2\gamma_{res}$ на первом этапе релаксации, а на втором этапе скорость

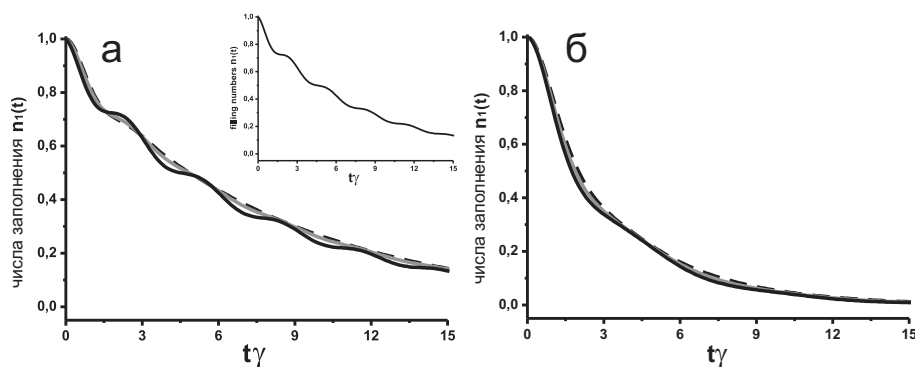


Рис. 6.19. Временная эволюция чисел заполнения в квантовой точке с начальным зарядом при наличии электрон-фононного взаимодействия в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии ($\Delta\varepsilon$). Черная кривая соответствует случаю при $g = 0$, серая кривая соответствует случаю при $g = 0, 1$, черная пунктирная линия соответствует случаю при $g = 0, 2$. а). $\Delta\varepsilon = -2, 0$, $\omega_0 = 2, 0$; б). $\Delta\varepsilon = -1, 0$, $\omega_0 = 1, 0$. Параметры $T = 0, 6$, $\gamma = 1, 0$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

релаксации заряда оказывается очень близкой к $2\gamma_{nonres}$. Таким образом, учет влияния электрон-фононного взаимодействия на временную эволюцию заряда в системе связанных квантовых точек приводит к ускорению процесса релаксации в два раза в случае положительной начальной расстройки между уровнями энергии.

Исследуем временную эволюцию заряда в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках ($\varepsilon_1 < \varepsilon_2$) (рис.6.19). Для отрицательной начальной расстройки электрон-фононное взаимодействие приводит к увеличению скорости релаксации. Эффект увеличения выражен значительно слабее, чем в случае положительной начальной расстройки. Временная эволюция чисел заполнения происходит в несколько этапов с различными характерными скоростями релаксации для каждого из этапов. В случае малых значений начальной расстройки (рис.6.19б) скорости релаксации заряда очень близки для обоих этапов релаксации и принимают значение близкое к величине γ_{res} как в отсутствии, так и при наличии электрон-фононного взаимодействия. С ростом величины расстройки в отсутствие электрон-фононного взаимодействия релаксация заряда на первом этапе происходит со скоростью γ_{res} , а на втором этапе со скоростью γ_{nonres} . Учет электрон-фононного взаимодействия не приводит к значительному изменению скоростей релаксации, и временная эволюция заряда характеризуется скоростями релаксации γ_{res} и γ_{nonres} для первого и второго этапов соответственно.

Еще одним эффектом, возникающим при релаксации заряда в свя-

занных квантовых точках при наличии электрон-фононного взаимодействия, является формирование осцилляций в зависимости чисел заполнения от времени. Осцилляции напрямую связаны с наличием в системе электрон-фононного взаимодействия и возникают вследствие образования дополнительного неупругого канала для перераспределения заряда в системе двух связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара. Неупругий канал туннелирования обусловлен процессами испускания и поглощения фононов при релаксации заряда между квантовыми точками. Этот эффект наиболее ярко выражен для случая, когда расстройка между уровнями энергии принимает значение близкое к фононной частоте (рис.6.19а). Осцилляции наибольшей амплитуды можно наблюдать для больших значений начальной расстройки (рис.6.19а и вставка на нем). Для фиксированного набора параметров системы амплитуда осцилляций определяется величиной константы электрон-фононного взаимодействия g (рис.6.19). Наличие осцилляций может приводить к уменьшению скорости релаксации электронных чисел заполнения по сравнению со значениями скорости релаксации в отсутствие электрон-фононного взаимодействия (пунктирная и непрерывная кривые черного цвета на рис.6.19а) для фиксированного набора параметров системы в определенных временных интервалах.

Таким образом, показано, что учет электрон-фононного взаимодействия в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при анализе временной эволюции заряда приводит к увеличению скорости релаксации локализованного заряда. Возникающие в процессе релаксации осцилляции во временной эволюции электронных чисел заполнения связаны с наличием процессов поглощения и испускания фононов при перераспределении заряда между уровнями энергии квантовых точек. Эффект ускорения релаксации за счет электрон-фононного взаимодействия необходимо всегда учитывать при определении параметров квантовых точек в процессе их интеграции в модули современной нанoeлектроники для создания элементов, работа которых основана на изменении зарядового состояния в процессе электронного транспорта.

§ 6.5. Выводы

Предложен метод для описания релаксации заряда в связанных квантовых точках, основанный на применении диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов и метода среднего поля, позволяющего учесть кулоновское взаимодействие в наноструктурах. С помощью данного метода детально исследованы особенности временной эволюции заряда, локализованного в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии межчастичного взаимодействия.

1. Показано, что кулоновское взаимодействие значительно влияет на релаксацию заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с резервуаром, и приводит к образованию нескольких характерных областей с различными скоростями релаксации. Впервые показано, что в связанных квантовых точках релаксация заряда при наличии кулоновского взаимодействия определяется тремя различными скоростями релаксации.

К настоящему моменту было обнаружено наличие трех различных скоростей релаксации в одной квантовой точке с кулоновским взаимодействием, связанной с состояниями непрерывного спектра [245]. В связанных квантовых точках было продемонстрировано наличие только двух различных скоростей релаксации [242, 243] в отсутствие в системе кулоновского взаимодействия.

2. Продемонстрировано, что основным механизмом немонотонной релаксации заряда в связанных квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия является перераспределение заряда между каналами релаксации в отдельной точке. Обнаруженный эффект практически полной перекачки заряда между различными модами внутри одной квантовой точки может быть использован для манипулирования зарядом в системе посредством его аккумуляции в различных пространственных областях и для создания элементов динамической памяти, основанных на переключении между несколькими стабильными состояниями.
3. Впервые обнаружено явление бифуркации в процессе релаксации заряда в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состоя-

ниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Показано, что можно изменять момент времени, в который наступает бифуркация, варьируя величину начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках и величину кулоновского взаимодействия. Такая особенность системы дает возможность для управления параметрами электронного транспорта на этапе роста квантовых точек. Явление бифуркации может быть использовано при создании на базе связанных квантовых точек логических переключателей, функционирующих на основе явления сверхбыстрого переключения между двумя стабильными состояниями. Кроме того, можно проводить кодировку квантовых битов для квантовой криптографии, используя особенности временной эволюции зарядовых состояний двух связанных квантовых точек.

4. Исследованы особенности релаксации заряда в системе, состоящей из произвольного числа квантовых точек с кулоновским взаимодействием, связанной с состояниями непрерывного спектра резервуара. Впервые показана возможность "пленения" заряда с ростом числа точек, несмотря на наличие в системе диссипации в состоянии непрерывного спектра резервуара. Саму систему при этом можно рассматривать как эффективную "зарядовую ловушку". Полученные результаты могут быть применены при осуществлении контролируемой локализации заряда в структурах сверхмалых размеров, что позволит не только исследовать фундаментальные особенности электронного транспорта в системах нанометровых размеров, но и использовать эффект пленения заряда для кодировки квантовых битов, используя спин одиночного электрона, локализованного в квантовой точке.
5. Исследована временная эволюция электронных чисел заполнения в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии электрон-фононного взаимодействия. Показано, что учет электрон-фононного взаимодействия приводит к увеличению скорости релаксации локализованного заряда. Возникающие в процессе релаксации осцилляции во временной эволюции электронных чисел заполнения связаны с наличием процессов поглощения и испускания фононов при перераспределении заряда между уровнями энергии квантовых точек. Эффект ускорения релак-

саци за счет электрон-фононного взаимодействия необходимо всегда учитывать при определении параметров квантовых точек в процессе их интеграции в модули современной наноэлектроники для создания элементов, работа которых основана на изменении зарядового состояния в процессе электронного транспорта.

ГЛАВА 7

Нестационарные эффекты в связанных квантовых точках с кулоновскими корреляциями

В предыдущей главе были рассмотрены особенности процесса релаксации заряд в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра, при наличии кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Учет кулоновского взаимодействия производился в приближении среднего поля [130], которое не позволяет исследовать особенности нестационарного электронного транспорта в реалистических системах сверхмалых размеров в случае, когда величина кулоновских корреляций сопоставима с расстоянием между энергетическими уровнями системы. В настоящей главе предложен метод анализа процессов релаксации заряда в связанных квантовых точках, позволяющий точно учесть кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках [297]. Метод анализа временной эволюции зарядовой плотности основан на применении кинетических уравнений для билинейных комбинаций гейзенберговских операторов. Предложенный подход для описания релаксации заряда в связанных квантовых точках впервые позволил точно вычислить все корреляторы для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии [297].

§ 7.1. Особенности релаксации заряда в связанных квантовых точках с учетом кулоновских корреляций локализованных электронов

Рассмотрим систему, состоящую из двух одноуровневых квантовых точек, последовательно связанных туннельными переходами как между собой, так и с состояниями непрерывного спектра резервуара (рис. 7.1) [297].

В каждой из точек находится по одному уровню с энергиями ε_1 и ε_2 соответственно. Квантовая точка с уровнем энергии ε_2 взаимодействует с состояниями непрерывного спектра резервуара. Будем называть квантовую точку, не связанную с состояниями непрерывного спектра, - первой, а

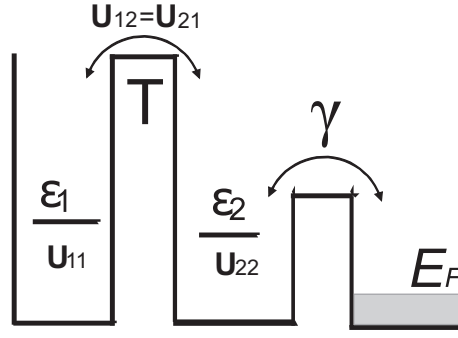


Рис. 7.1. Схематическое изображение уровней энергии (ε_1 и ε_2) в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями в каждой из точек (U_{ii}) и между точками (U_{ij}). Одна из квантовых точек (вторая) взаимодействует (γ) с состояниями непрерывного спектра. Уровни энергии точек расположены выше уровня Ферми состояний непрерывного спектра (E_F).

квантовую точку, взаимодействующую с резервуаром - второй. Учтем кулоновские корреляции локализованных электронов как внутри каждой из точек, так и между точками. Тогда процессы релаксации заряда в рассматриваемой системе можно описать с помощью гамильтониана:

$$\hat{H} = \hat{H}_D + \hat{H}_{tun} + \hat{H}_{res} \quad (7.1)$$

Гамильтониан \hat{H}_D , описывающий взаимодействующие квантовые точки может быть записан в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_D = & \sum_{i=1,2\sigma} \varepsilon_i c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + U_{11} n_{11\sigma} n_{11-\sigma} + U_{22} n_{22\sigma} n_{22-\sigma} + \\ & + U_{12} (n_{11\sigma} + n_{11-\sigma}) (n_{22\sigma} + n_{22-\sigma}) + \sum_{\sigma} T (c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{1\sigma} c_{2\sigma}^+) \end{aligned} \quad (7.2)$$

где ε_i (индексы $i = 1$ и $i = 2$ относятся к первой и второй квантовым точкам) - вырожденные по спину уровни энергии, U_{ii} - кулоновские корреляции, возникающие в случае двойного заполнения каждой из точек, и U_{ij} - кулоновские корреляции, соответствующие взаимодействию электронов разных точек. Рождение/уничтожение электрона со спином $\sigma = \pm 1/2$ на уровнях энергии точек описывается операторами $c_{i\sigma}^+/c_{i\sigma}$ и соответствующим оператором электронных чисел заполнения $n_{ii\sigma}$. Процессы туннелирования электронов между квантовыми точками описываются амплитудой туннельных переходов T , которая не зависит от спина и направления импульса.

Состояния непрерывного спектра резервуара описываются гамильтонианом:

$$\hat{H}_{res} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p c_{p\sigma}^+ c_{p\sigma} \quad (7.3)$$

где операторы $c_{p\sigma}^+/c_{p\sigma}$ соответствуют рождению/уничтожению электрона в состоянии резервуара со спином σ и импульсом p . Туннельные переходы между второй квантовой точкой и состояниями непрерывного спектра резервуара можно описать с помощью гамильтониана:

$$\hat{H}_{tun} = \sum_{p\sigma} t (c_{p\sigma}^+ c_{2\sigma} + c_{p\sigma} c_{2\sigma}^+) \quad (7.4)$$

где t - туннельная амплитуда, не зависящая от спина и направления импульса. Полагая плотность состояний непрерывного спектра постоянной величиной ν_0 , определим скорость релаксации в состоянии непрерывного спектра γ следующим образом $\gamma = \pi\nu_0 t^2$.

Будем рассматривать случай, когда уровни энергии в квантовых точках расположены значительно выше уровня Ферми. Тогда выполнено следующее условие: $(\varepsilon_i - \varepsilon_F)/\gamma \gg 1$. Исследуем поведение чисел заполнения при низких температурах, когда положение уровня Ферми четко выражено, а функции распределения электронов в состояниях непрерывного спектра резервуара - это фермиевские ступеньки.

Будем везде полагать $\hbar = 1$. Тогда кинетические уравнения для билинейных комбинаций гейзенберговских операторов $c_{i\sigma}^+/c_{i\sigma}$

$$\begin{aligned} c_{1\sigma}^+ c_{1\sigma} &= \hat{n}_1^\sigma(t) & c_{2\sigma}^+ c_{2\sigma} &= \hat{n}_2^\sigma(t) \\ c_{1\sigma}^+ c_{2\sigma} &= \hat{n}_{12}^\sigma(t) & c_{2\sigma}^+ c_{1\sigma} &= \hat{n}_{21}^\sigma(t), \end{aligned} \quad (7.5)$$

описывающих временную эволюцию электронных чисел заполнения, можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_{11}^\sigma &= -T(\hat{n}_{21}^\sigma - \hat{n}_{12}^\sigma) \\ i \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_{22}^\sigma &= T(\hat{n}_{21}^\sigma - \hat{n}_{12}^\sigma) - 2i\gamma \hat{n}_{22}^\sigma \\ i \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_{21}^\sigma &= T(\hat{n}_{22}^\sigma - \hat{n}_{11}^\sigma) + [\xi + (U_{11} - U_{21})\hat{n}_{11}^{-\sigma}] \hat{n}_{21}^\sigma - \\ &- (U_{22} - U_{12})\hat{n}_{21}^\sigma \hat{n}_{22}^{-\sigma} - i\gamma \hat{n}_{21}^\sigma \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial}{\partial t} \hat{n}_{12}^{\sigma} &= -T(\hat{n}_{22}^{\sigma} - \hat{n}_{11}^{\sigma}) - [\xi + (U_{11} - U_{21})\hat{n}_{11}^{-\sigma}] \hat{n}_{12}^{\sigma} + \\
&+ (U_{22} - U_{12})\hat{n}_{12}^{\sigma} \hat{n}_{22}^{-\sigma} - i\gamma \hat{n}_{12}^{\sigma}
\end{aligned} \tag{7.6}$$

где $\xi = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$ расстройка между уровнями энергии в квантовых точках. Система уравнений (7.6) содержит выражения для парных корреляторов $\hat{n}_1^{-\sigma} \hat{n}_{21}^{\sigma}$ и $\hat{n}_1^{-\sigma} \hat{n}_{12}^{\sigma}$, которые прямым образом определяют временную эволюцию чисел заполнения и, следовательно, должны быть вычислены. Будем пренебрегать корреляционными функциями высших порядков между локализованными электронами и электронами проводимости резервуара и выполним усреднение по электронным состояниям резервуара.

Введем следующие обозначения для парных корреляторов: $K_{ijj'j'}^{\sigma\sigma'} = \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{i'\sigma'}^+ c_{j'\sigma'} \rangle$ и рассмотрим парамагнитный случай $\langle \hat{n}_i^{\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_i^{-\sigma} \rangle$. Тогда верны следующие соотношения:

$$\begin{aligned}
K_{2111}^{\sigma-\sigma} &= \langle \hat{n}_{21}^{\sigma} \hat{n}_{11}^{-\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{21}^{-\sigma} \hat{n}_{11}^{\sigma} \rangle \\
K_{1211}^{\sigma-\sigma} &= \langle \hat{n}_{12}^{\sigma} \hat{n}_{11}^{-\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{12}^{-\sigma} \hat{n}_{11}^{\sigma} \rangle \\
K_{2122}^{\sigma-\sigma} &= \langle \hat{n}_{21}^{\sigma} \hat{n}_{22}^{-\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{21}^{-\sigma} \hat{n}_{22}^{\sigma} \rangle \\
K_{1222}^{\sigma-\sigma} &= \langle \hat{n}_{12}^{\sigma} \hat{n}_{22}^{-\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{12}^{-\sigma} \hat{n}_{22}^{\sigma} \rangle
\end{aligned} \tag{7.7}$$

Систему уравнений для парных корреляторов можно представить в компактном матричном виде следующим образом (символ $[\]$ означает коммутатор, а символ $\{ \}$ - антикоммутатор):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \widehat{K} = [\widehat{K}, \widehat{H}'] + \{\widehat{K}, \widehat{\Gamma}\} + \widehat{\Upsilon}, \tag{7.8}$$

где \widehat{K} матрица парных корреляторов

$$\widehat{K} = \begin{pmatrix} K_{2211}^{\sigma-\sigma} & K_{1211}^{\sigma-\sigma} & K_{2221}^{\sigma-\sigma} & K_{1221}^{\sigma-\sigma} \\ K_{2111}^{\sigma-\sigma} & K_{1111}^{\sigma-\sigma} & K_{2121}^{\sigma-\sigma} & K_{1121}^{\sigma-\sigma} \\ K_{2212}^{\sigma-\sigma} & K_{1212}^{\sigma-\sigma} & K_{2222}^{\sigma-\sigma} & K_{1222}^{\sigma-\sigma} \\ K_{2112}^{\sigma-\sigma} & K_{1112}^{\sigma-\sigma} & K_{2122}^{\sigma-\sigma} & K_{1122}^{\sigma-\sigma} \end{pmatrix} = \|K_{ij}\| \tag{7.9}$$

матрица \widehat{H}' имеет вид:

$$\widehat{H}' = \begin{pmatrix} 0 & T & T & 0 \\ T & \xi + U_{11} - U_{21} & 0 & T \\ T & 0 & -\xi + U_{22} - U_{12} & T \\ 0 & T & T & 0 \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

а матрица туннельных взаимодействий $\widehat{\Gamma}$ определена следующим образом:

$$\widehat{\Gamma} = \begin{pmatrix} -i\gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\gamma \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

Система уравнений (7.8) содержит выражения для корреляторов локализованных электронов высших порядков $K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma}$ и $K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma}$. Вклад от корреляторов локализованных электронов высших порядков может быть записан в матричной форме $\widehat{\Upsilon}$:

$$\widehat{\Upsilon} = \begin{pmatrix} 0 & U_2 K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & U_1 K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & 0 \\ -U_2 K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & 0 & 0 & -U_2 K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma} \\ -U_1 K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & 0 & 0 & -U_1 K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma} \\ 0 & U_2 K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & U_1 K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (7.12)$$

где использованы следующие обозначения для энергий кулоновского взаимодействия: $U_1 = U_{11} - U_{21}$ и $U_2 = U_{22} - U_{12}$.

Если временная эволюция заряда начинается с состояния, когда весь заряд в системе локализован в первой квантовой точке, а вторая квантовая точка при этом пустая, то система уравнений (7.8) для парных корреляторов удовлетворяет следующим начальным условиям: $K_{1111}^{\sigma-\sigma}(0) = 1$; $K_{2222}^{\sigma-\sigma}(0) = 0$; $K_{iji'j'}^{\sigma-\sigma}(0) = 0$ для других комбинаций индексов i, j . Если весь заряд в начальный момент времени локализован во второй квантовой точке, то система уравнений (7.8) для парных корреляторов удовлетворяет начальным условиям: $K_{2222}^{\sigma-\sigma}(0) = 1$; $K_{1111}^{\sigma-\sigma}(0) = 0$; $K_{iji'j'}^{\sigma-\sigma}(0) = 0$ для других комбинаций индексов i, j . В случае, когда начальный заряд в системе поровну распределен между квантовыми точками, система уравнений (7.8) для парных корреляторов удовлетворяет начальным условиям:

$K_{1111}^{\sigma-\sigma}(0) = K_{2222}^{\sigma-\sigma}(0) = K_{1122}^{\sigma-\sigma}(0) = 1$ и $K_{iji'j'}^{\sigma-\sigma}(0) = 0$ для других комбинаций индексов i, j .

Корреляторы высших порядков $K_{121122}^{\sigma-\sigma-\sigma}$ и $K_{211122}^{\sigma-\sigma-\sigma}$ принимают значения в точности равные нулю, так как являются решением линейной однородной системы уравнений с нулевыми начальными условиями. Система уравнений (7.6), (7.8), которая описывает временную эволюцию локализованного заряда в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с резервуаром, может быть проанализирована с применением численных методов исследования систем дифференциальных уравнений. Прежде, чем приводить результаты численного анализа, покажем, что для исследуемой системы можно получить точное аналитическое решение, описывающее особенности релаксации заряда, которое для определенного набора параметров имеет простой и компактный вид.

§ 7.2. Аналитическое решение задачи о временной эволюции чисел заполнения в системе связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра резервуара

Рассмотрим конфигурацию системы, которая позволяет получить простое точное аналитическое решение для временной эволюции электронных чисел заполнения без применения численных методов решения системы уравнений (7.8). Исследуем временную эволюцию состояния системы, для которого весь заряд локализован в первой квантовой точке на уровне энергии ε_1 ($n_{1\sigma}(0) = n_0 = 1$). Будем учитывать кулоновские корреляции только между локализованными электронами в первой точке. Такая модель хорошо описывает связанные квантовые точки одна из которых узкая и глубокая, а вторая мелкая и широкая.

Если в начальный момент времени весь заряд в системе локализован в первой квантовой точке, то электронные числа заполнения во второй точке в процессе релаксации заряда принимают малые значения, и слабыми эффектами кулоновского взаимодействия во второй точке по сравнению с первой, можно пренебречь [290]. Кроме того, учет кулоновского взаимодействия во второй точке не приводит к появлению в системе принципиально новых физических эффектов. Его можно рассматривать как перенормировку расстройки между уровнями энергии в системе [285]: расстройку ξ

необходимо заменить на величину $\tilde{\xi} = \xi - U_{22} + U_{12}$, а кулоновское взаимодействие в первой квантовой точке U_{11} - на соответствующую величину $\tilde{U}_{11} = U_{11} + U_{22} - 2U_{12}$.

Формальное решение системы уравнений для парных корреляторов (7.8) можно записать, используя оператор эволюции. Временная эволюция матричных элементов K_{ij} (7.9) определяется выражением:

$$K_{ij}(t) = \sum_{mn} (e^{-i\hat{H}t})_{im} K_{mn}(0) (e^{i\hat{H}^+t})_{nj} \quad (7.13)$$

где величина \hat{H} определяется следующим образом: $\hat{H} = \hat{H}' + \hat{\Gamma}$.

Теперь введем оператор эволюции:

$$\Phi_{ij}(t) = (e^{-i\hat{H}t})_{ij} \quad (7.14)$$

Так как элемент матрицы $K(0)_{22}$ в выражении (7.9) совпадает с $K_{1111}^{\sigma-\sigma}(0) = 1$, временная эволюция парных корреляторов описывается выражениями:

$$\begin{aligned} K_{2111}^{\sigma-\sigma} &= (e^{-i\hat{H}t})_{12} K(0)_{22} (e^{i\hat{H}^+t})_{22} = \Phi_{12}(t) \tilde{\Phi}_{22}(t) \\ K_{1211}^{\sigma-\sigma} &= (e^{-i\hat{H}t})_{22} K(0)_{22} (e^{i\hat{H}^+t})_{21} = \Phi_{22}(t) \tilde{\Phi}_{21}(t) \end{aligned} \quad (7.15)$$

Оператор эволюции $\tilde{\Phi}_{22}(t)$ можно получить из выражения для оператора $\Phi_{22}(t)$ с помощью следующей подстановки: $t \rightarrow -t$ и $\gamma \rightarrow -\gamma$. Парный коррелятор $K_{1211}^{\sigma-\sigma}$ является комплексно сопряженным с коррелятором $K_{2111}^{\sigma-\sigma}$.

Операторы эволюции $\Phi_{ij}(t)$ определяются системой уравнений:

$$\begin{pmatrix} i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{12}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{22}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{32}(t) \\ i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{42}(t) \end{pmatrix} = \hat{H} \cdot \begin{pmatrix} \Phi_{12}(t) \\ \Phi_{22}(t) \\ \Phi_{32}(t) \\ \Phi_{42}(t) \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

с начальными условиями:

$$\Phi_{ij}(0) = \delta_{ij} \quad (7.17)$$

Характеристическое уравнение на собственные значения λ_i оператора эволюции $\Phi_{ij}(t)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} & (H_{11} - \lambda)(H_{22} - \lambda)(H_{33} - \lambda)(H_{44} - \lambda) - T^2 \\ & \times [(H_{11} - \lambda)(H_{22} - \lambda) + (H_{11} - \lambda)(H_{33} - \lambda) \\ & + (H_{33} - \lambda)(H_{44} - \lambda) + (H_{22} - \lambda)(H_{44} - \lambda)] = 0 \end{aligned} \quad (7.18)$$

где коэффициенты H_{11} , H_{22} , H_{33} и H_{44} определены выражениями:

$$\begin{aligned} H_{11} &= H_{44} = -i\gamma \\ H_{22} &= \xi + U_{11} \\ H_{33} &= -\xi - 2i\gamma \end{aligned} \quad (7.19)$$

Каждому собственному значению λ_i соответствует собственный вектор:

$$\psi_i = \begin{pmatrix} \alpha_i \\ \beta_i \\ \gamma_i \\ \delta_i \end{pmatrix} \quad (7.20)$$

В рассматриваемом случае необходимо получить выражения для операторов эволюции $\Phi_{12}(t)$ и $\Phi_{22}(t)$, которые удовлетворяют начальным условиям $\Phi_{22}(0) = 1$ и $\Phi_{ij}(0) = 0$ соответственно.

Решение системы уравнений, определяющей функции $\Phi_{12}(t)$ и $\Phi_{22}(t)$, можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \Phi_{12}(t) &= \sum_{i=1}^4 C_i \alpha_i e^{-i\lambda_i t} \\ \Phi_{22}(t) &= \sum_{i=1}^4 C_i \beta_i e^{-i\lambda_i t} \end{aligned} \quad (7.21)$$

где постоянные C_i определяются из начальных условий для системы уравнений.

$$\sum_i C_i \alpha_i = 0$$

$$\begin{aligned}
\sum_i C_i \beta_i &= 1 \\
\sum_i C_i \gamma_i &= 0 \\
\sum_i C_i \delta_i &= 0
\end{aligned} \tag{7.22}$$

Временная эволюция чисел заполнения $n_1(t)$ определяется неоднородной частью уравнений системы (7.6):

$$\begin{aligned}
&\{[(i\frac{\partial}{\partial t} + i\gamma)^2 + \gamma^2][(i\frac{\partial}{\partial t} + i\gamma)^2 - \xi^2] - 4T^2(i\frac{\partial}{\partial t} + i\gamma)^2\}n_1(t) = \\
&= (i\frac{\partial}{\partial t} + 2i\gamma) \cdot T[U_1(G_2^{-1}K_{1211}^{\sigma-\sigma} + G_1^{-1}K_{2111}^{\sigma-\sigma}) - U_2(G_2^{-1}K_{2111}^{\sigma-\sigma} + G_1^{-1}K_{2122}^{\sigma-\sigma})]
\end{aligned} \tag{7.23}$$

где операторы G_2^{-1} и G_1^{-1} имеют вид:

$$\begin{aligned}
G_2^{-1} &= i\frac{\partial}{\partial t} + \xi + i\gamma \\
G_1^{-1} &= i\frac{\partial}{\partial t} - \xi + i\gamma
\end{aligned} \tag{7.24}$$

Решение уравнения (7.23) описывает релаксацию заряда и содержит две части: общее решение однородного уравнения $n_1^h(t)$ (правая часть уравнения равна нулю) и частное решение неоднородного уравнения $\tilde{n}_1(t)$.

$$n_1(t) = n_1^h(t) + \tilde{n}_1(t) = n_1^h(t) + \int_0^t \mathbf{G}(t-t')P(t')dt' \tag{7.25}$$

где $\mathbf{G}(t-t')$ - функция Грина уравнения (7.23) с $\delta(t-t')$ - функцией в правой части, а $P(t')$ - правая часть уравнения (7.23), которая появляется из-за наличия в системе кулоновского взаимодействия.

Общее решение однородного уравнения (7.23) имеет вид:

$$n_1^h(t) = n_1^0[A'e^{-i(E_1-E_1^*)t} + 2Re(B'e^{-i(E_1-E_2^*)t}) + C'e^{-i(E_2-E_2^*)t}] \tag{7.26}$$

где коэффициенты A' , B' и C' определены следующим образом:

$$\begin{aligned}
A' &= \frac{|E_2 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2} & C' &= \frac{|E_1 - \varepsilon_1|^2}{|E_2 - E_1|^2} \\
B' &= -\frac{(E_2 - \varepsilon_1)(E_1^* - \varepsilon_1)}{|E_2 - E_1|^2}
\end{aligned} \tag{7.27}$$

Собственные значения E_i :

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - i\gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2 + i\gamma)^2 + 4T^2} \quad (7.28)$$

Функция Грина $\mathbf{G}(t-t')$ уравнения(7.23) может быть записана в виде:

$$\mathbf{G}(t-t') = \sum_{i=1}^4 a_i e^{-i\lambda_i(t-t')} \Theta(t-t') \quad (7.29)$$

частное решение неоднородного уравнения (7.23) имеет вид:

$$\tilde{n}_1(t) = \sum_{ijk} a_i C_j e^{-\lambda_i t} \frac{1}{-i(\lambda_j - \lambda_k^* - \lambda_i)} (e^{-i(\lambda_j - \lambda_k^* - \lambda_i)t} - 1) \quad (7.30)$$

где значения $\lambda_{j(k)}$ можно определить из уравнения (7.18) и λ_i являются корнями характеристического уравнения, полученного из уравнения (7.23):

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= -i\gamma \pm \left[\frac{4T^2 + \xi^2 - \gamma^2}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(4T^2 + \xi^2 - \gamma^2)^2 + 4\xi^2\gamma^2} \right]^{1/2} \\ \lambda_{3,4} &= -i\gamma \pm \left[\frac{4T^2 + \xi^2 - \gamma^2}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(4T^2 + \xi^2 - \gamma^2)^2 + 4\xi^2\gamma^2} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (7.31)$$

Можно записать связь собственных значений E_i с корнями уравнения

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= E_{1,2} - E_{1,2}^* \\ \lambda_3 &= E_1 - E_2^* \\ \lambda_4 &= E_2 - E_1^* \end{aligned} \quad (7.32)$$

Коэффициенты a_i определены с помощью выражений:

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)(\lambda_4 - \lambda_1)}, \\ a_2 &= \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_4 - \lambda_2)}, \\ a_3 &= \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)(\lambda_4 - \lambda_3)}, \\ a_4 &= \frac{1}{(\lambda_1 - \lambda_4)(\lambda_2 - \lambda_4)(\lambda_3 - \lambda_4)}. \end{aligned} \quad (7.33)$$

Выражения (7.25) - (7.33) позволяют исследовать кинетику заряда, локализованного в начальный момент времени в первой квантовой точке в случае, когда кулоновское взаимодействие учтено только между локализованными электронами в первой точке. Теперь рассмотрим два предельных случая исследуемой системы, когда выражения, описывающие динамику электронных чисел заполнения, имеют достаточно простой и компактный вид. Первый предельный случай соответствует нулевой расстройке между пустыми уровнями энергии в квантовых точках: $\xi/\gamma \ll 1$. Вторым предельным случаем относится к ситуации, когда сумма расстройки и половины величины кулоновского взаимодействия равна нулю. Это означает, что туннелирование между полузаполненным уровнем энергии в первой квантовой точке и пустым уровнем энергии во второй точке происходит резонансным образом: $(\xi + \frac{U_{11}}{2})/\gamma \ll 1$. Будем рассматривать оба случая в приближении, для которого выполнено условие $T \ll \gamma \ll U_{11}$.

Случай нулевой расстройки между пустыми уровнями энергии в квантовых точках $\xi/\gamma \ll 1$

Собственные значения характеристического уравнения (7.23) в первом случае ($\xi/\gamma \ll 1$) с точностью $\frac{T^2}{U_{11}^2}$ имеют вид:

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= U_{11} - i\frac{2T^2\gamma}{U^2} \\ \lambda_2 &= -i\gamma - i\frac{2T^2}{\gamma} \\ \lambda_3 &= -2i\gamma - i\frac{2T^2}{\gamma} \\ \lambda_4 &= -i\gamma\end{aligned}\tag{7.34}$$

Тогда операторы эволюции можно записать в явном виде:

$$\begin{aligned}\Phi_{12}(t) &= \frac{T}{U_{11}}(e^{-iU_{11}t - \frac{2T^2\gamma}{U_{11}^2}t} - e^{-\gamma t - \frac{2T^2}{\gamma}t}) \\ \Phi_{22}(t) &= (1 - \frac{2T^2}{U^2})e^{-iU_{11}t - \frac{2T^2\gamma}{U_{11}^2}t} + \frac{2T^2}{U_{11}^2}e^{-\gamma t - \frac{2T^2}{\gamma}t}\end{aligned}\tag{7.35}$$

и временная эволюция парных корреляторов $K_{2111}^{\sigma-\sigma}$ и $K_{1211}^{\sigma-\sigma}$ определяется произведениями:

$$\begin{aligned} K_{2111}^{\sigma-\sigma}(t) &= \Phi_{12}(t)\Phi_{22}^*(t) \\ K_{1211}^{\sigma-\sigma}(t) &= (K_{2111}^{\sigma-\sigma})^* \end{aligned} \quad (7.36)$$

Выражение для $P(t)$ (правой части уравнения (7.23)) в случае резонансного туннелирования между пустыми уровнями $\xi/\gamma = 0$ имеет вид:

$$P(t) = 4T^2\gamma e^{-\frac{4T^2\eta}{\gamma}t} + 2T^2U_{11}e^{-\gamma t} \cos(U_{11}t) \quad (7.37)$$

где $\eta = \frac{\gamma^2}{U_{11}^2 + \gamma^2}$. Для значения параметра $\eta = 1/2$ временная эволюция неоднородной части решения для электронных чисел заполнения $\tilde{n}_1(t)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{n}_1(t) &= \frac{T^2}{\gamma^2} [(-2\gamma t - e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t})e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t} + e^{-2\gamma t} + 4e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t} - 4e^{-\gamma t}] + \\ &\quad + \frac{2T^2U_{11}e^{-\gamma t}}{\gamma^3} [\cos(U_{11}t) - 1] + 0\left(\frac{T^2}{U_{11}^2} \frac{\gamma}{U_{11}}\right) \end{aligned} \quad (7.38)$$

Для значений параметра $\eta \ll 1$ временная эволюция чисел заполнения $\tilde{n}_1(t)$ определяется выражением:

$$\tilde{n}_1(t) = \frac{1}{1 - 2\eta} (e^{-4\frac{T^2\eta}{\gamma}t} - e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t}) + 0\left(\frac{T^2}{\gamma^2}\right) \quad (7.39)$$

Случай резонансного туннелирования между полузаполненным уровнем энергии в первой квантовой точке и пустым уровнем энергии во второй точке $(\xi + \frac{U_{11}}{2})/\gamma \ll 1$

Во втором случае $((\xi + \frac{U_{11}}{2})/\gamma \ll 1$ и $U_{11}/\gamma \gg 1$) собственные значения характеристического уравнения (7.23) имеют вид:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{U_{11}}{2} - i\frac{8T^2\gamma}{U_{11}^2} \\ \lambda_2 &= -i\gamma + \frac{8T^2}{U_{11}} \\ \lambda_3 &= -2i\gamma + \frac{U_{11}}{2} - \frac{i8T^2\gamma}{U_{11}^2} + \frac{4T^2}{U_{11}} \\ \lambda_4 &= -i\gamma \end{aligned} \quad (7.40)$$

Выражения для операторов эволюции можно записать в явном виде:

$$\begin{aligned}\Phi_{12}(t) &= \frac{2T}{U_{11}} \left(e^{-i\frac{U_{11}}{2}t - \frac{8T^2\gamma t}{U_{11}^2}} - e^{-\gamma t} \right) \\ \Phi_{22}(t) &= \left(1 - \frac{8T^2}{U_{11}^2} \right) e^{-i\frac{U_{11}}{2}t - \frac{8T^2\gamma t}{U_{11}^2}} + \frac{8T^2}{U_{11}^2} e^{-\gamma t}\end{aligned}\quad (7.41)$$

Когда выполнено условие $(\xi + \frac{U_{11}}{2})/\gamma = 0$, выражение для $P(t)$ с точностью $\frac{T^3}{U_{11}^3}$ и $\frac{\gamma^2}{U_{11}^2}$ имеет вид:

$$P(t) = -T^2 U_{11}^2 (e^{i\frac{U_{11}}{2}t - \gamma t} + h.c.) - 4T^2 \gamma^2 e^{-\frac{16T^2\gamma t}{U_{11}^2}} \quad (7.42)$$

Неоднородная часть временной эволюции электронных чисел заполнения $\tilde{n}_1(t)$ с точностью $\frac{T^2}{U_{11}^2}$ может быть записана в виде:

$$\tilde{n}_1(t) = -\frac{4}{7} (1 - e^{-14\frac{T^2\gamma t}{U_{11}^2}}) e^{-\frac{2T^2\gamma t}{U_{11}^2}} - 2\frac{T^2}{\gamma U_{11}} e^{-\gamma t} \sin\left(\frac{U_{11}}{2}t\right) + 0\left(\frac{T^2}{U_{11}^2}\right) \quad (7.43)$$

Необходимо заметить, что релаксация чисел заполнения в рассматриваемой системе может быть проанализирована с использованием более простого метода - приближения среднего поля. В этом приближении корреляционные функции $U_{11} \langle \hat{n}_i^{-\sigma} \hat{n}_{ij}^{\sigma} \rangle$ в уравнениях (7.6) заменяются выражениями $U_{11} \langle \hat{n}_i^{-\sigma} \rangle \langle \hat{n}_{ij}^{\sigma} \rangle$. Такая замена справедлива в случае, когда электронные числа заполнения $n_i^{-\sigma}$ изменяются достаточно медленно. Для некоторых значений параметров системы приближение среднего поля дает качественно верные результаты. Но в общем случае для верного описания процессов релаксации необходимо использовать систему уравнений, содержащую корреляционные функции всех порядков.

§ 7.3. Временная эволюция электронных чисел заполнения в связанных квантовых точках

Временная эволюция электронных чисел заполнения определяется распределением заряда в системе в начальный момент времени и соотношениями между параметрами системы: положением уровней энергии, величинами кулоновского взаимодействия и соотношением между амплитудой

туннельных переходов и скоростью релаксации в состоянии непрерывного спектра.

Исследуем сначала особенности релаксации заряда в случае, когда в начальный момент времени весь заряд в системе локализован в первой квантовой точке (рис.7.2а,г и рис.7.3а,г). Рассмотрим как случай положительной начальной расстройки (рис.7.2а,г), так и случай отрицательной начальной расстройки ξ (рис.7.3а,г). В случае положительной начальной расстройки скорость релаксации электронных чисел заполнения в первой квантовой точке уменьшается с ростом величины кулоновского взаимодействия локализованных электронов (кривая серого цвета и пунктирная кривая черного цвета на рис.7.2а) по сравнению со значением скорости релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия (кривая черного цвета на рис.7.2а). Уменьшение скорости релаксации вызвано увеличением расстройки между уровнями энергии в квантовых точках, обусловленным кулоновскими корреляциями локализованных электронов. Одновременно с уменьшением скорости релаксации электронных чисел заполнения в первой квантовой точке происходит уменьшение амплитуды чисел заполнения во второй точке (рис.7.2г). Когда выполнено соотношение $\frac{\xi}{\gamma} < 1$ между параметрами системы, временная эволюция чисел заполнения происходит в несколько этапов с различными величинами скоростей релаксации. На первом этапе релаксация заряда происходит с характерной скоростью, близкой по значению к величине $\gamma_{res} = 2\frac{T^2}{\gamma}$ ($t\gamma \leq 1,75$). На этом этапе происходит увеличение амплитуды чисел заполнения во второй квантовой точке (рис.7.2г). Эволюция чисел заполнения на следующем временном интервале в обеих квантовых точках протекает со скоростью близкой по значению к величине $\gamma_{nonres} = \gamma_{res} \cdot \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \xi^2}$.

На рисунке 7.3а,г приведены результаты расчетов релаксации заряда в случае отрицательной начальной расстройки между уровнями энергии в квантовых точках. Для фиксированного набора параметров системы связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра $(T, \gamma, \varepsilon_i)$, существует критическая величина кулоновского взаимодействия локализованных электронов, для которой происходит смена режима релаксации. Для величин кулоновского взаимодействия меньших критического значения, релаксация заряда происходит со скоростью большей, чем в отсутствие кулоновских корреляций в системе. Максимальное значение амплитуды чисел заполнения во второй квантовой точке возрас-

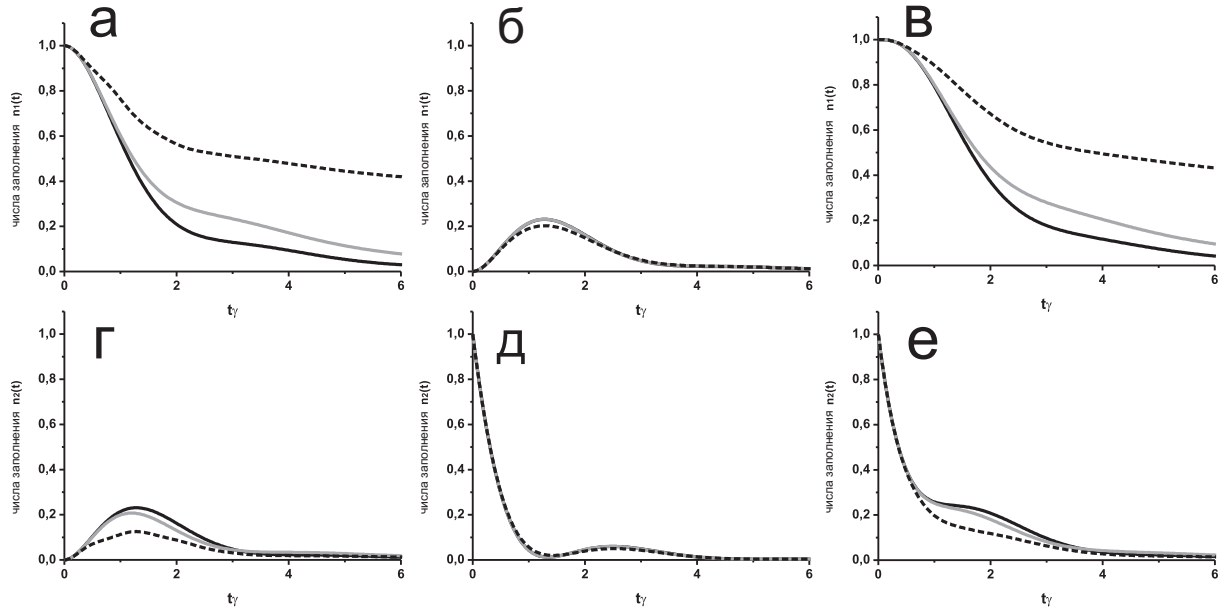


Рис. 7.2. Временная эволюция чисел заполнения при наличии кулоновского взаимодействия для случая положительной начальной расстройки ξ/γ а)-в) в первой и г)-е) во второй квантовой точке. Черная кривая: $U_{11}/\gamma = 0$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 0$; $U_{22}/\gamma = 0$, серая кривая: $U_{11}/\gamma = 2, 0$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 1, 2$; $U_{22}/\gamma = 1, 5$; черная пунктирная кривая: $U_{11}/\gamma = 10, 0$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 4, 0$; $U_{22}/\gamma = 8, 0$. а), г) $n_1(0) = 1$; $n_2(0) = 0$; б), д) $n_1(0) = 0$; $n_2(0) = 1$ в), е) $n_1(0) = 1$; $n_2(0) = 1$. Для всех графиков значения параметров $T/\gamma = 0, 6$, $\gamma = 1, 0$ и $\xi/\gamma = 0, 8$ имеют одинаковые значения.

тает по сравнению со случаем, когда кулоновское взаимодействие в исследуемой системе отсутствует (кривая черного цвета и кривая серого цвета на рис. 7.3а,г).

Для величин кулоновского взаимодействия больших критического релаксация электронных чисел заполнения происходит со скоростью меньшей, чем скорость релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия. Максимальное значение амплитуды чисел заполнения во второй квантовой точке уменьшается по сравнению со случаем, когда кулоновское взаимодействие в исследуемой системе отсутствует (кривая черного цвета и пунктирная кривая черного цвета на рис. 7.3а,г). Уменьшение скорости релаксации происходит из-за смены знака начальной расстройки, вызванной наличием сильных кулоновских корреляций локализованных электронов. Таким образом, релаксация заряда происходит аналогично случаю положительной начальной расстройки (рис. 7.2а,г). В этом случае, скорости релаксации принимают значения очень близкие к значениям, полученным при релаксации заряда в конфигурации с положительной начальной расстройкой между уровнями энергии.

Рассмотрим теперь особенности релаксации заряда, когда в началь-

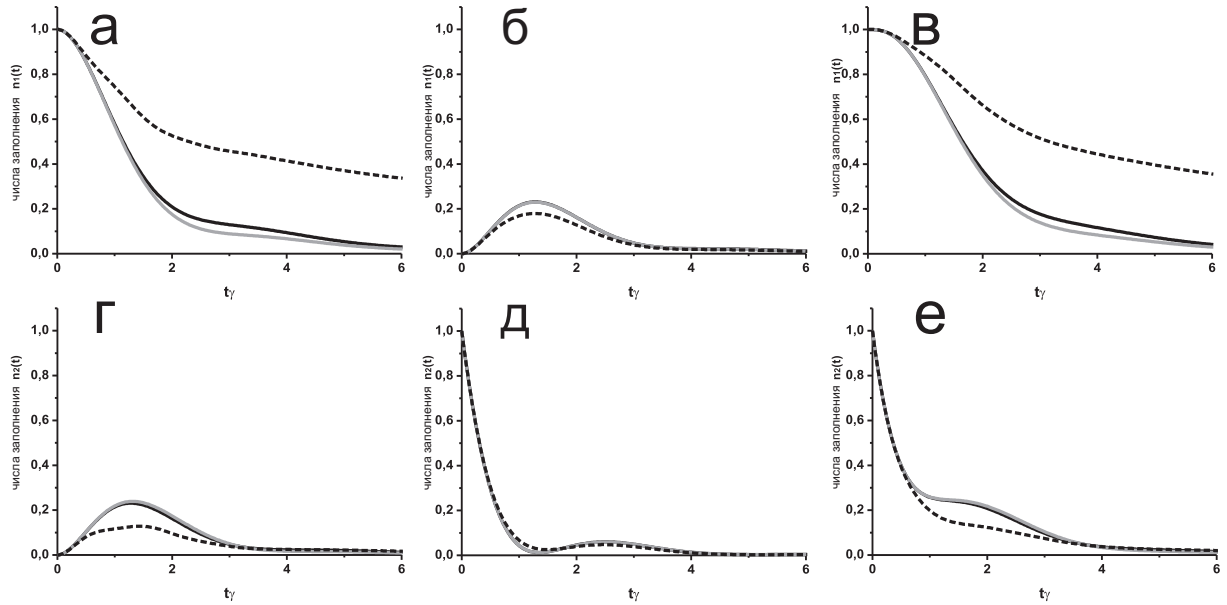


Рис. 7.3. Временная эволюция чисел заполнения при наличии кулоновского взаимодействия для случая отрицательной начальной расстройки ξ/γ а)-в) в первой и г)-е) во второй квантовых точках. Черная кривая: $U_{11}/\gamma = 0$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 0$; $U_{22}/\gamma = 0$, серая кривая: $U_{11}/\gamma = 1,8$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 1,3$; $U_{22}/\gamma = 1,5$; черная пунктирная кривая: $U_{11}/\gamma = 10,0$; $U_{12}/\gamma = U_{21}/\gamma = 4,0$; $U_{22}/\gamma = 8,0$. а), г) $n_1(0) = 1$; $n_2(0) = 0$; б), д) $n_1(0) = 0$; $n_2(0) = 1$ в), е) $n_1(0) = 1$; $n_2(0) = 1$. Для всех графиков значения параметров $\Gamma/\gamma = 0,6$, $\gamma = 1,0$ и $\xi/\gamma = -0,8$ имеют одинаковые значения.

ный момент времени весь заряд в системе локализован во второй квантовой точке (рис.7.2б,д и рис.7.3б,д). При такой начальной зарядовой конфигурации кулоновские корреляции незначительно влияют на временную эволюцию электронных чисел заполнения как в случае положительной, так и в случае отрицательной расстроек между уровнями энергии по сравнению с процессом релаксации в отсутствие кулоновского взаимодействия. Кулоновские корреляции слабым образом сказываются на поведении системы, и релаксация заряда происходит со скоростью очень близкой к величине γ . Из-за наличия прямого канала туннелирования в состояния непрерывного спектра резервуара амплитуда заряда, локализованного во второй квантовой точке, уменьшается быстрее, чем в случае, когда весь заряд в системе в начальный момент времени локализован в первой квантовой точке (рис.7.2а, рис.7.3а и рис.7.2д, рис.7.3д).

Результаты расчетов, приведенные на рис.7.2в,е и рис.7.3в,е, демонстрируют временную эволюцию чисел заполнения в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с резервуаром, при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов в наиболее интересном случае, когда в начальный момент времени заряд в системе равномерно

распределен между квантовыми точками.

Зависимости чисел заполнения от времени демонстрируют образование плато в первой квантовой точке на первом этапе релаксации рис.7.2в,е и рис.7.3в,е). Характерный временной масштаб первого этапа релаксации имеет порядок $1/\gamma$. Наличие плато означает, что практически весь заряд остается локализованным в первой квантовой точке из-за того, что уровень энергии во второй точке остается заполненным. Релаксация заряда из первой точки во вторую начинается только тогда, когда уровень энергии во второй квантовой точке опустошается на половину (становится заполненным на половину) вследствие прямого туннелирования из второй квантовой точки в состояния непрерывного спектра резервуара.

Когда уровни энергии обеих квантовых точек заполнены двумя электронами с противоположными направлениями спина, релаксация заряда из первой точки во вторую невозможна из-за выполнения принципа Паули. Таким образом, на первом этапе релаксации заряд остается локализованным в первой квантовой точке. Учет кулоновского взаимодействия приводит к значительному перераспределению заряда между квантовыми точками (рис.7.2в,е и рис.7.3в,е). Релаксация заряда во второй квантовой точке на первом этапе происходит со скоростью близкой к величине γ .

На втором этапе релаксации происходит формирование плато в зависимости чисел заполнения от времени для второй квантовой точки. Ширина плато имеет порядок сопоставимый с величиной γ . Вторым этапом соответствует смене режимов релаксации в квантовых точках и, следовательно, изменению величин скоростей релаксации заряда в обеих точках. Релаксация заряда в точках на третьем этапе происходит со скоростью близкой к величине $\gamma_{nonres} = \gamma_{res} \cdot \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + \xi^2}$.

Рассмотрим теперь временную эволюцию электронных чисел заполнения в случае, когда выполнено соотношение $(\xi + U_1 - U_2)/\gamma \ll 1$ между параметрами системы. В этом случае рост величины кулоновского взаимодействия приводит к уменьшению скорости релаксации зарядовой плотности (рис.7.4а). Для больших значений параметра $(U_1 - U_2)$ релаксация заряда происходит достаточно медленно и имеет величину порядка $\gamma_{nonres} = 2 \frac{T^2 \gamma}{(U_1 - U_2)^2}$, которая характерна для системы двух связанных квантовых точек с величиной расстройки между уровнями энергии $|\xi| \simeq U_1 - U_2$. Уменьшение величины параметра $(U_1 - U_2)$ приводит к выполнению условия резонансного туннелирования между уровнями энергии квантовых то-

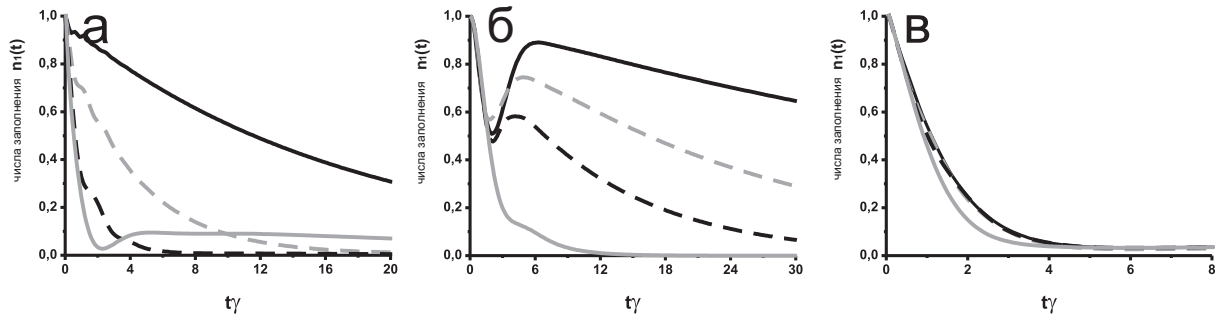


Рис. 7.4. Различные режимы временной эволюции чисел заполнения в первой квантовой точке $n_1(t)$ в первой квантовой яме при наличии кулоновского взаимодействия. а). $\frac{\xi+U_1-U_2}{\gamma} = 0$ ($(U_1 - U_2)/\gamma = 10$, $\xi/\gamma = -10$ - черная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 5$, $\xi/\gamma = -5$ - серая пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 3$, $\xi/\gamma = -3$ - черная пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 1$, $\xi/\gamma = -1$ - серая кривая); б). $\frac{\xi+U_1-U_2}{\gamma} \sim 1$ ($(U_1 - U_2)/\gamma = 10$, $\xi/\gamma = -7$ - черная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 5$, $\xi/\gamma = -4$ - серая пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 3$, $\xi/\gamma = -2,5$ - черная пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 1$, $\xi/\gamma = -0,75$ - серая кривая); в). $\xi/\gamma = 0$ ($U/\gamma = 10$ - черная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 5$ - серая пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 3$ - черная пунктирная кривая; $(U_1 - U_2)/\gamma = 1$ - серая кривая). Параметры $T/\gamma = 0,6$, $\gamma = 1$ одинаковы для всех графиков.

чек, поэтому происходит увеличение скорости релаксации.

На рис. 7.4в представлены результаты расчета для случая резонансного туннелирования между пустыми уровнями энергии $\xi/\gamma = 0$. В этом случае релаксация заряда происходит со скоростью близкой к величине $\gamma_{res} = 2\frac{T^2}{\gamma}$ и не зависящей от величины кулоновского взаимодействия локализованных электронов. Необходимо заметить, что релаксация определяется не только экспоненциальными слагаемыми $e^{-\gamma t}$ и $e^{-\frac{2T^2}{\gamma}t}$, но и предэкспоненциальным множителем, который линейно возрастает со временем при резонансном туннелировании (см. уравнение (7.38)).

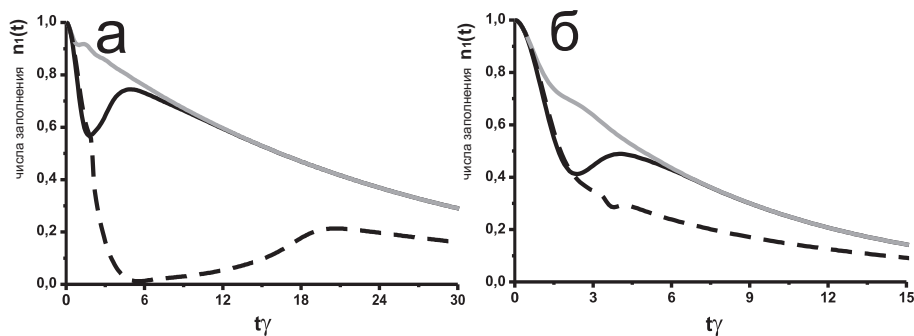


Рис. 7.5. Временная эволюция электронных чисел заполнения $n_1(t)$ при наличии кулоновского взаимодействия: сравнение точного решения и решения, полученного методом среднего поля. Черная кривая соответствует точному решению, черная пунктирная кривая соответствует расчетом, проведенным с использованием метода среднего поля. Серая кривая описывает релаксацию заряда в отсутствии кулоновского взаимодействия. а). $(U_1 - U_2)/\gamma = 5$, $\xi/\gamma = -3$; б). $(U_1 - U_2)/\gamma = 3$, $\xi/\gamma = -2$. Параметры $T/\gamma = 0,6$, $\gamma = 1$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

Особый режим релаксации заряда существует в системе при выпол-

нении условия $\frac{\xi+U_1-U_2}{\gamma} \sim 1$ (рис.7.4б). В этом режиме учет кулоновских корреляций локализованных электронов приводит к резкому спаду и последующему резкому увеличению амплитуды электронных чисел заполнения. На первом этапе релаксации заряда происходит быстрое опустошение уровня энергии в первой квантовой точке в результате резонансного туннелирования между эффективным уровнем энергии первой квантовой точки и уровнем энергии второй точки. Из третьего и четвертого уравнений системы (7.6) следует, что изменение эффективной расстройки между уровнями энергий в точках определяется величиной $(U_1-U_2)Re[\frac{\langle \hat{n}_1^{-\sigma}(t)\hat{n}_{12}^{\sigma}(t) \rangle}{\langle \hat{n}_{12}^{\sigma}(t) \rangle}]$, отличающейся от типичного выражения для расстройки, полученного в приближении среднего поля $(U_1-U_2)\langle \hat{n}_i^{-\sigma}(t) \rangle$. Таким образом, продемонстрировано, что именно кулоновские корреляции локализованных электронов приводят к появлению резкого глубокого провала с последующим восстановлением амплитуды чисел заполнения, которое не наблюдалось при анализе временной эволюции заряда, проведенном методом среднего поля.

В момент времени, когда из-за наличия в системе кулоновских корреляций происходит резкое уменьшение значения эффективного уровня энергии в первой точке до величины уровня энергии во второй точке, происходит повторное заполнение эффективного уровня энергии первой точки за счет туннелирования с уровня энергии второй точки. В результате происходит резкое увеличение амплитуды чисел заполнения в первой квантовой точке после почти половинного опустошения (формирования провала). Амплитуда чисел заполнения практически достигает начального значения для больших величин кулоновских корреляций в системе. После провала релаксация заряда происходит с характерной скоростью близкой к величине $\gamma_{nonres} = 2\frac{T^2\gamma}{\xi^2}$.

Анализ точного решения системы уравнений, описывающей временную эволюцию электронных чисел заполнения, показывает, что немонотонный характер релаксации заряда связан с наличием в системе кулоновских корреляций локализованных электронов. Немонотонность временной эволюции определяется неоднородной частью точного решения для чисел заполнения в первой квантовой точке (первое слагаемое в выражении (7.43)). При этом возникновение неоднородности связано с точным учетом кулоновских корреляций всех порядков ($P(t)$ в уравнении (7.23) и в уравнении (7.25)). Поэтому в приближении среднего поля зависимость электронных чисел заполнения от времени значительно отличается от зависимости, по-

лученной при точном учете кулоновских корреляций всех порядков. Ширина провала имеет характерную величину $1/8 \cdot \gamma_{nonres}^{-1}$.

Эффект резкого двукратного уменьшения амплитуды чисел заполнения с последующим ее восстановлением, обусловленный кулоновскими корреляциями локализованных электронов, может быть использован для создания на основе связанных квантовых точек обратимых зарядовых переключателей, способных многократно переключаться между двумя устойчивыми состояниями.

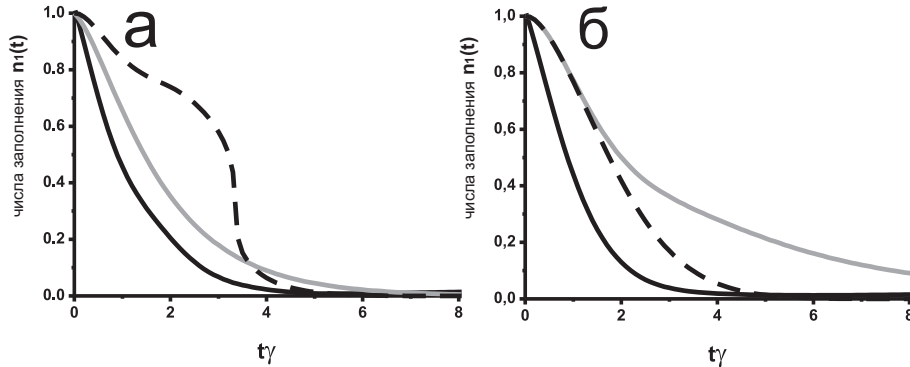


Рис. 7.6. Временная эволюция электронных чисел заполнения $n_1(t)$ при наличии кулоновского взаимодействия: сравнение точного решения и решения, полученного методом среднего поля. Черная кривая соответствует точному решению, черная пунктирная кривая соответствует расчетом, проведенным с использованием метода среднего поля. Серая кривая описывает релаксацию заряда в отсутствии кулоновского взаимодействия. а). $\xi/\gamma = 0$, $(U_1 - U_2)/\gamma = 3$; б). $\xi/\gamma = 0$, $(U_1 - U_2)/\gamma = 1$. Параметры $T/\gamma = 0,6$, $\gamma = 1$ принимают одинаковые значения для всех графиков.

Сравнение точного решения для временной эволюции электронных чисел заполнения в связанных квантовых точках при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов с результатами расчетов, полученных в приближении среднего поля, приведено на рис. 7.5 и рис.7.6. Оба метода позволяют выявить типичные особенности, возникающие при релаксации заряда, такие как релаксация в несколько этапов с различными характерными скоростями. При использовании метода среднего поля в некотором диапазоне параметров системы можно проследить образование провала во временной эволюции чисел заполнения (рис.7.5). На рис.7.5 также продемонстрировано, что оба метода хорошо описывают начальную стадию релаксации заряда, давая очень близкие значения скоростей релаксации. Однако, в методе среднего поля провал во временной эволюции чисел заполнения воспроизводится не точно, так как метод среднего поля не учитывает точно кулоновские корреляции локализованных электронов.

В случае резонансного туннелирования между уровнями энергии в

квантовых точках ($\xi/\gamma = 0$) результаты расчетов временной эволюции электронных чисел заполнения, полученные методом среднего поля, и точным решением системы уравнений, учитывающих кулоновские корреляции всех порядков, демонстрируют значительное расхождение (рис.7.6а). В соответствии с точным решением релаксация заряда происходит монотонным образом, в то время как расчеты, проведенные на основе метода среднего поля, показывают резкое немонотонное уменьшение амплитуды чисел заполнения. При уменьшении величины кулоновских корреляций можно наблюдать лучшее совпадение результатов расчетов (рис.7.6б).

Таким образом, исследована релаксация заряда, локализованного в начальный момент в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов. Предложен новый метод описания процессов в такой системе, основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые применены для электронных чисел заполнения. Данный подход позволил получить систему уравнений, которая точно учитывает корреляции локализованных электронов во всех порядках, и позволяет вычислить точно все корреляторы для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии.

Проведено сравнение результатов, полученных предложенным методом, с результатами, полученными методом среднего поля. Показано, что система уравнений, учитывающая кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках, имеет точное аналитическое решение.

Впервые продемонстрировано, что в такой системе существует эффект динамического пленения заряда в одной из квантовых точек, когда в начальный момент времени уровни энергий обеих квантовых точек заполнены. Кроме того, обнаружено, что в процессе релаксации заряда происходит формирование резкого глубокого провала с последующим восстановлением амплитуды чисел заполнения, которое не наблюдалось при анализе временной эволюции заряда, проведенном методом среднего поля. Таким образом, продемонстрировано, что причиной появления обоих эффектов являются именно кулоновские корреляции локализованных электронов.

§ 7.4. Выводы

Исследованы особенности релаксации заряда, локализованного в начальный момент в связанных квантовых точках, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра при наличии кулоновских корреляций локализованных электронов. Предложен новый метод описания процессов в такой системе, основанный на использовании уравнений Гейзенберга, которые применены для электронных чисел заполнения. Данный подход позволил впервые получить систему уравнений, которая точно учитывает корреляции локализованных электронов во всех порядках, и вычислить точно все корреляционные функции для конечного значения величины кулоновского взаимодействия, сравнимой с расстоянием между уровнями энергии.

1. Исследованы особенности релаксации заряда для различных начальных условий и учтены как кулоновские корреляции между локализованными электронами в каждой из квантовых точек, так и кулоновские корреляции между различными квантовыми точками. В случае, когда в начальный момент времени уровни энергий обеих квантовых точек заполнены, впервые обнаружен эффект динамического пленения заряда в одной из точек, который является прямым следствием наличия в системе кулоновских корреляций.
2. Продемонстрировано, что режимы релаксации заряда определяются в первую очередь соотношениями между параметрами исследуемой системы. Проведено сравнение результатов, полученных предложенным новым методом, с результатами, полученными при использовании подхода, основанного на применении метода среднего поля. Обнаружено, что существуют области значений параметров системы, для которых временная эволюция не может быть полностью корректно описана на основе метода среднего поля. Показано, что система уравнений, учитывающая кулоновские корреляции локализованных электронов всех порядков, имеет точное аналитическое решение.

Заключение

На основании проведенных исследований и представленных в диссертационной работе результатов, сформулируем основные выводы:

1. Продемонстрирована определяющая роль локализованных состояний, образованных отдельными примесными атомами, в формировании особенностей туннельных характеристик в системах пониженной размерности и в структурах с характерными размерами, сравнимыми с радиусом локализации примесей в широком диапазоне напряжений смещения на туннельном контакте. Предложен теоретический подход, позволивший исследовать характерный вид особенностей пространственного распределения локальной электронной плотности в окрестности поверхностных локализованных состояний, образованных отдельными глубокими и мелкими примесными атомами с кулоновским взаимодействием при существовании нескольких каналов для туннелирования электронов. Данный подход позволяет по виду спектров локальной туннельной проводимости анализировать влияние кулоновского взаимодействия на кинетические характеристики исследуемой системы.
2. Предложена теоретическая модель, позволившая объяснить микроскопическую природу низкочастотного шума со спектром $1/f^\alpha$, связанного с состояниями, локализованными на поверхности полупроводников, и исследовать особенности спектральной плотности туннельного тока в широком диапазоне напряжений на туннельном контакте. Модель учитывает эффекты многократного рассеяния электронов проводимости на кулоновском потенциале, создаваемом зарядом локализованного состояния в области туннельного контакта, изменяющимся в процессе туннелирования электронов. Разработанная модель позволяет диагностировать зарядовые состояния и типы примесных атомов, расположенных в подповерхностных слоях полупроводниковых кристаллов.

С использованием предложенной модели обнаружено, что перенорми-

ровка амплитуд туннельных переходов при учете кулоновского взаимодействия локализованных электронов с электронами непрерывного спектра в берегах туннельного контакта может приводить к появлению сингулярных особенностей в высокочастотной области спектра туннельного тока и к сдвигу сингулярных особенностей из низкочастотной области в высокочастотную область при изменении напряжения смещения на туннельном контакте.

3. Развита методика, позволяющая анализировать электронный транспорт и туннельные характеристики сильно коррелированных систем с несколькими уровнями энергии и точно учитывающий кулоновские корреляции локализованных электронов. Показано, что кулоновские корреляции в двухуровневой системе приводят к инверсной заселенности и к обратимому перераспределению заряда между одноэлектронными состояниями системы. Найдено, что кулоновские корреляции отвечают за появление отрицательной туннельной проводимости. Наличие эффектов перераспределения заряда при изменении напряжения на туннельном контакте открывает возможности для управления пространственным распределением заряда в системе нанометровых размеров с несколькими уровнями энергии и создания зарядовых переключателей на базе многоуровневых квантовых точек и локализованных состояний примесных атомов. Предсказано появление отрицательной туннельной проводимости, которую можно использовать для создания диодов.
4. Показано, что полные электронные числа заполнения в системе сильно связанных квантовых точек могут уменьшаться с ростом величины напряжения из-за кулоновских корреляций локализованных электронов. Обнаружены эффекты перераспределения заряда между двухэлектронными состояниями с различными спиновыми конфигурациями при изменении напряжения на туннельном контакте, обусловленные наличием кулоновских корреляций. Установлено, что для определенных значений параметров системы возникает инверсная заселенность, когда заполнение триплетного состояния превосходит заполнение синглетного состояния. Продемонстрировано появление отрицательной туннельной проводимости. Найдено, что перераспределение заряда при изменении напряжения на туннельном контакте

открывает возможности для формирования заданных зарядовых и спиновых конфигураций в системах нанометровых размеров.

5. Теоретически обоснована возможность создания нового класса полупроводниковых приборов, принцип работы которых основан на протекании нестационарного туннельного тока через систему трех связанных квантовых точек, взаимодействующих с состояниями непрерывного спектра. Такие устройства могут быть использованы в качестве эталонов тока. Обнаружено, что периодическое изменение положения уровня энергии в одной из точек приводит к возникновению ненулевого среднего туннельного тока, протекающего через систему при нулевом напряжении на туннельном контакте. Физическим механизмом, ответственным за этот эффект, является различие скоростей релаксации при резонансном и нерезонансном туннелировании между квантовыми точками. Предложенный механизм формирования нестационарного туннельного тока может проявляться при комнатных температурах для квантовых точек нанометрового размера. Немонотонный вид зависимости среднего туннельного тока от частоты изменения положения уровня энергии в квантовой точке можно применить для стабилизации частоты в электронных насосах и турникетах, созданных на основе связанных квантовых точек.
6. Предложен метод описания релаксации заряда в связанных квантовых точках, основанный на применении диаграммной техники Келдыша для неравновесных процессов и метода среднего поля, позволяющего учесть кулоновское взаимодействие в наноструктурах. С помощью этого метода детально исследованы особенности временной эволюции заряда, локализованного в связанных квантовых точках, взаимодействующих с резервуаром, при наличии межчастичного взаимодействия. Обнаружено, что немонотонная релаксация заряда в квантовых точках при наличии кулоновского взаимодействия является результатом перераспределения заряда между каналами релаксации в отдельных точках, а не между каналами релаксации разных точек. В системе связанных квантовых точек с кулоновским взаимодействием обнаружен и исследован бифуркационный режим релаксации заряда. Показано, что момент резкой смены скоростей релаксации можно варьировать, изменяя параметры системы. Эффект резкого переключе-

чения между двумя устойчивыми режимами релаксации можно использовать для создания сверхбыстрых зарядовых переключателей. Продемонстрировано, что электрон-фононное взаимодействие приводит к увеличению скорости релаксации заряда.

7. Предложена и исследована система связанных квантовых точек с кулоновскими корреляциями, взаимодействующая с состояниями непрерывного спектра, в которой с ростом числа точек происходит изменение кинетики релаксации заряда. Показано, что в такой системе заряд практически полностью остается локализованным в начальной точке, несмотря на наличие диссипации в системе; процесс можно рассматривать как "пленение" заряда, а систему квантовых точек - как "зарядовую ловушку". При увеличении числа точек в предложенной системе происходит подавление роли кулоновских корреляций в процессе релаксации заряда.
8. Разработан новый метод теоретического описания нестационарного электронного транспорта в связанных квантовых точках при наличии сильных кулоновских корреляций. В развитом подходе точно учтены кулоновские корреляции локализованных электронов во всех порядках по взаимодействию. Предложенный подход позволил предсказать эффект динамического пленения заряда в системе связанных квантовых точек, взаимодействующих с термостатом, который является прямым следствием наличия в системе кулоновских корреляций. Показано, что существует особый режим релаксации заряда с резким уменьшением амплитуды и последующим почти полным ее восстановлением, который можно применить для создания обратимых зарядовых переключателей на основе связанных квантовых точек. Проведено сравнение результатов, полученных в работе с учетом электронных корреляций, с результатами, полученными при использовании метода среднего поля. Найдено, что существуют области значений параметров, для которых метод среднего поля не позволяет корректно описать временную эволюцию системы.

Полученные в диссертационной работе результаты позволили объяснить природу особенностей неравновесного электронного транспорта в наноструктурах, таких как: низкочастотные сингулярности в спектрах туннельного тока, возникновение отрицательной туннельной проводимости,

”включение” и ”выключение” примесных атомов в спектрах туннельного тока, возникновение осцилляций локальной плотности состояний в окрестности поверхностных низкоразмерных структур. В работе предсказан ряд эффектов, связанных с сильными межчастичными корреляциями, которые могут быть применены для контроля за локальными характеристиками электронного транспорта в наноструктурах, для создания излучателей, генерирующих импульсы заданной частоты, и для конструирования элементов динамической памяти. Кроме того, развита теория нестационарного электронного транспорта в системах с сильным межчастичным взаимодействием, описывающая особенности переходных процессов в полупроводниковых наноструктурах, которая может быть использована при создании обратимых зарядовых переключателей и нового класса приборов - неадиабатических электронных насосов на основе связанных квантовых точек. Теоретические подходы и методы, разработанные в диссертационной работе, позволили описать особенности электронного транспорта в сильно коррелированных неравновесных нестационарных полупроводниковых наноструктурах.

В заключение хочу выразить глубокую признательность д.ф.-м.н., доценту Н. С. Масловой, д.ф.-м.н. члену-корреспонденту РАН П.И. Арсееву и к.ф.-м.н. за плодотворные дискуссии и критические замечания, позволившие значительно углубить понимание обсуждаемых вопросов. Отдельную благодарность хочу выразить заведующему кафедрой полупроводников, д.ф.-м.н. профессору В. С. Днепровскому и профессору кафедры полупроводников, д.ф.-м.н. И.П. Звягину за постоянное внимание в процессе написания диссертационной работой.

Литература

1. Metzner W., Salmhofer M., Honerkamp C., Meden V., Schönhammer K. Functional renormalization group approach to correlated fermion systems // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Vol. 84. — Pp. 299–352.
2. Gull E., Millis A. J., Lichtenstein A. I., Rubtsov A. N., Troyer M., Werner P. Continuous-time monte carlo methods for quantum impurity models // *Rev. Mod. Phys.* — 2011. — Vol. 83. — Pp. 349–404.
3. Maier T., Jarrell M., Pruschke T., Hettler M. H. Quantum cluster theories // *Rev. Mod. Phys.* — 2005. — Vol. 77. — Pp. 1027–1080.
4. Johnson J. B. The Schottky Effect in Low Frequency Circuits // *Phys. Rev.* — 1925. — Vol. 26, no. 1. — Pp. 71–85.
5. Schottky W. Small-Shot Effect and Flicker Effect // *Phys. Rev.* — 1926. — Vol. 28, no. 6. — P. 1331.
6. Möller R., Esslinger A., Koslowski B. Noise in vacuum tunneling: Application for a novel scanning microscope // *Appl. Phys. Lett.* — 1989. — Vol. 55, no. 22. — Pp. 2360–2362.
7. Koslowski B., Baur C. New potentiometry method in scanning tunneling microscopy: Exploiting the correlation of fluctuations // *J. Appl. Phys.* — 1995. — Vol. 77, no. 1. — Pp. 28–33.
8. Maeda K., Siguta S., Kurita H. e. Spatial variation of $1/f$ current noise in scanning tunneling microscopes // *J. Vac. Technol. B.* — 1994. — Vol. 12, no. 3. — Pp. 2140–2143.
9. Lozano M., Tringides M. Surface diffusion measurements for STM tunneling current fluctuations // *Europhys. Lett.* — 1995. — Vol. 30, no. 9. — Pp. 537–543.
10. Nauen A., Hapke-Wurst I., Hohls F., Zeitler U., Haug R. J., Pierz K. Shot noise in self-assembled InAs quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66, no. 16. — P. 161303.

11. *Nauen A., Hohls F., Könemann J., Haug R. J.* Shot noise in resonant tunneling through a zero-dimensional state with a complex energy spectrum // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 11. — P. 113316.
12. *Nauen A., Hohls F., Maire N., Pierz K., Haug R. J.* Shot noise in tunneling through a single quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70, no. 3. — P. 033305.
13. *Philipp J. B., Alff L., Marx A., Gross R.* Low-frequency $1/f$ noise in doped manganite grain-boundary junctions // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66, no. 22. — P. 224417.
14. *Chen Y., Webb R. A.* Full shot noise in mesoscopic tunnel barriers // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73. — P. 035424.
15. *Vandersypen L. M., Elzerman J. M., Schouten R. N., Willems van Beveren L. H., Hanson R., Kouwenhoven L. P.* Real-time detection of single electron tunneling using a quantum point contact // *Appl. Phys. Lett.* — 2004. — Vol. 85, no. 19. — Pp. 4394–4396.
16. *Safonov S. S., Savchenko A. K., Bagrets D. A., Jouravlev O. N., Nazarov Y. V., Linfield E. H., Ritchie D. A.* Enhanced Shot Noise in Resonant Tunneling via Interacting Localized States // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 13. — P. 136801.
17. *Gramespacher T., Büttiker M.* Quantum Shot Noise at Local Tunneling Contacts on Mesoscopic Multiprobe Conductors // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81, no. 13. — Pp. 2763–2766.
18. *Galperin Y. M., Chao K. A.* Resonant tunneling in the presence of a two-level fluctuator: Low-frequency noise // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52, no. 16. — Pp. 12126–12134.
19. *Burin A. L., Shklovskii B. I., Kozub V. I., Galperin Y. M., Vinokur V.* Many electron theory of $1/f$ noise in hopping conductivity // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 075205.
20. *Altshuler B. L., Levitov L. S., Yakovets A. Y.* Nonequilibrium noise in a mesoscopic conductor: A mesoscopic analysis // *JETP Lett.* — 1994. — Vol. 59, no. 12. — Pp. 857–862.

21. *Gutman D. B., Gefen Y.* Shot noise in disordered junctions: Interaction corrections // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64, no. 20. — P. 205317.
22. *Hamasaki M.* Effect of electron correlation on current and current noise for the single- and the two-impurity Anderson model // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 11. — P. 115313.
23. *López R., Aguado R., Platero G.* Shot noise in strongly correlated double quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69, no. 23. — P. 235305.
24. *Dong B., Cui H. L., Lei X. L., Horing N. J. M.* Shot noise of inelastic tunneling through quantum dot systems // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71, no. 4. — P. 045331.
25. *Weymann I., Barnas J.* Shot noise and tunnel magnetoresistance in multilevel quantum dots: effects of cotunneling // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 075305.
26. *Thielmann A., Hettler M., König J., Scgon G.* Cotunneling current and shot noise in quantum dots // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95. — P. 146806.
27. *Cresti A., Parravicini G.* Dephasing effects and shot noise in quantum Hall wires: Green's function formalism // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 78. — P. 115313.
28. *Yao J., Chen Y.-C., Ventra M. D., Yang Z. Q.* Effect of atomic geometry on shot noise in aluminum quantum point contacts // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 73. — P. 233407.
29. *Chen Y.-C., Di Ventra M.* Shot noise in nanoscale conductors from first principles // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67, no. 15. — P. 153304.
30. *Yurke B., Kochanski G. P.* Momentum noise in vacuum tunneling transducers // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 41, no. 12. — Pp. 8184–8194.
31. *Lesovik G. B.* Excess quantum noise in 2d ballistic point contacts // *JETP Lett.* — 1989. — Vol. 49, no. 9. — Pp. 592–594.
32. *Engel H.-A., Loss D.* Asymmetric Quantum Shot Noise in Quantum Dots // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 93, no. 13. — P. 136602.

33. Rothstein E. A., Entin-Wohlman O., Aharony A. Noise spectra of a biased quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 79. — P. 075307.
34. Kiesslich G., Wacker A., Schöll E. Shot noise of coupled semiconductor quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 12. — P. 125320.
35. Levitov L. S., Lesovik G. B. Charge distribution in quantum shot noise // *JETP Lett.* — 1993. — Vol. 58, no. 3. — Pp. 230–235.
36. Beenakker C. W. J., Büttiker M. Suppression of shot noise in metallic diffusive conductors // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 46, no. 3. — Pp. 1889–1892.
37. van Wees B. J., van Houten H., Beenakker C. W. J., Williamson J. G., Kouwenhoven L. P., van der Marel D., Foxon C. T. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 60, no. 9. — Pp. 848–850.
38. Korotkov A. N., Likharev K. K. Shot noise suppression at one-dimensional hopping // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61, no. 23. — Pp. 15975–15987.
39. Stephany J. F. Origin of $1/f$ noise in metallic conductors and semiconductors // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 46, no. 19. — Pp. 12175–12180.
40. Rakhmanov A. L., Kugel K. I., Blanter Y. M., Kagan M. Y. Resistivity and $1/f$ noise in nonmetallic phase-separated manganites // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 63. — P. 174424.
41. Sboychakov A. O., Rakhmanov A. L., Kugel K. I., Kagan M. Y., Brodsky I. V. Tunnelling magnetoresistance and $1/f$ noise in phase-separated manganites // *Journal of Phys.-Cond. Matt.* — 2003. — Vol. 15. — Pp. 1705–1717.
42. Bobyl A. V., Gaeviski M. E., Khrebtov I. A., Konnikov S. G., Shantsev D. V., Solovev V., Suris R. A., Tkachenko A. D. Resistance flicker noise and current percolation in C-oriented YBa₂Cu₃O₇ - x films in the vicinity of T-C // *Physica C.* — 1995. — Vol. 247. — Pp. 7–33.
43. Galaktionov A. V., Golubev D. S., Zaikin A. D. Current fluctuations and electron-electron interactions in coherent conductors // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 085317.

44. *Golubev D. S., Galaktionov A. V., Zaikin A. D.* Electron transport and current fluctuations in short coherent conductors // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 205417.
45. *Pal A. N., Ghosh A.* Resistance noise in electrically biased bilayer graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102, no. 12. — P. 126805.
46. *Lin Y.-M., Avouris P.* Strong suppression of electrical noise in bilayer graphene nanodevices // *Nano Lett.* — 2008. — Vol. 8, no. 8. — Pp. 2119–2125.
47. *Liu G., Rumyantsev S., Shur M., Balandin A.* Origin of of $1/f$ noise in graphene multilayers: Surface vs. volume // *Appl. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 102. — P. 093111.
48. *Liu G., Rumyantsev S., Shur M., Balandin A.* Graphene thickness-graded transistors with reduced electronic noise // *Appl. Phys. Lett.* — 2012. — Vol. 100. — P. 033103.
49. *Hossain M. Z., Rumyantsev S. L., Teweldebrhan D., Shahil K. M., Shur M., Balandin A.* $1/f$ noise in conducting channels of topological insulator materials // *Phys. Status Solidi.* — 2011. — Vol. A208, no. 1. — Pp. 144–146.
50. *Flinn I.* Extent of the $1/f$ noise spectrum // *Nature.* — 1968. — Vol. 219. — Pp. 1356–1357.
51. *Voss R., Clarke J.* $1/f$ noise in music and speech // *Nature.* — 1975. — Vol. 258. — Pp. 317–318.
52. *Gilden D., Thornton T., Mallon M.* $1/f$ noise in music and speech // *Science.* — 1995. — Vol. 267. — Pp. 1837–1839.
53. *Schoelkopf R., Wahlgren P., Kozhevnikov A., Desling P., Prober D.* $1/f$ noise in music and speech // *Science.* — 1998. — Vol. 280. — Pp. 1238–1242.
54. *Weissman M. B.* $1/f$ noise and other slow, nonexponential kinetics in condensed matter // *Rev. Mod. Phys.* — 1988. — Vol. 60, no. 2. — Pp. 537–571.

55. *Rogers C. T., Buhrman R. A.* Composition of $1/f$ Noise in Metal-Insulator-Metal Tunnel Junctions // *Phys. Rev. Lett.* — 1984. — Vol. 53, no. 13. — Pp. 1272–1275.
56. *Dutta P., Horn P. M.* Low-frequency fluctuations in solids: $1/f$ noise // *Rev. Mod. Phys.* — 1981. — Vol. 53, no. 3. — Pp. 497–516.
57. *Alers G. B., Weissman M. B.* Mechanical relaxations and $1/f$ noise in Bi, Nb, and Fe films // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 44, no. 14. — Pp. 7192–7201.
58. *Ralls K. S., Ralph D. C., Buhrman R. A.* Individual-defect electromigration in metal nanobridges // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40, no. 17. — Pp. 11561–11570.
59. Fermi-edge singularity in resonant tunneling / A. K. Geim, P. C. Main, N. La Scala, L. Eaves, T. J. Foster, P. H. Beton, J. W. Sakai, F. W. Sheard, M. Henini et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72, no. 13. — Pp. 2061–2064.
60. *Sah C. T., Hielscher F. H.* Evidence of the surface origin of the $\frac{1}{f}$ noise // *Phys. Rev. Lett.* — 1966. — Vol. 17, no. 18. — Pp. 956–958.
61. *Celasco M., Fiorillo F., Masoero A.* Comment on $\frac{1}{f}$ noise and its temperature dependence in silver and copper // *Phys. Rev. B.* — 1979. — Vol. 19, no. 2. — Pp. 1304–1306.
62. *Fleetwood D. M., Masden J. T., Giordano N.* $\frac{1}{f}$ noise in platinum films and ultrathin platinum wires: Evidence for a common, bulk origin // *Phys. Rev. Lett.* — 1983. — Vol. 50, no. 6. — Pp. 450–453.
63. *Zimmerman N. M., Scofield J. H., Mantese J. V., Webb W. W.* Volume versus surface origin of $1/f$ noise in metals // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34, no. 2. — Pp. 773–777.
64. *Aleshkin V. Y., Reggiani L.* Electron transport and shot noise in double-barrier resonant diodes: The role of Pauli and Coulomb correlations // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64, no. 24. — P. 245333.
65. *Matveev K. A., Larkin A. I.* Interaction-induced threshold singularities in tunneling via localized levels // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 46, no. 23. — Pp. 15337–15347.

66. *Mahan G. D.* Excitons in Degenerate Semiconductors // *Phys. Rev.* — 1967. — Vol. 153, no. 3. — Pp. 882–889.
67. *Keldysh L. V.* Diagram technique for nonequilibrium processes // *Sov. Phys. JETP.* — 1965. — Vol. 20, no. 4. — Pp. 1018–1030.
68. *Asenov A.* Random dopant induced threshold voltage lowering and fluctuations in sub 50 nm mosfets: a statistical 3d atomistic simulation study // *Nanotechnology.* — 1999. — Vol. 10. — Pp. 153–158.
69. *Kane B.* A silicon-based nuclear spin quantum computer // *Nature.* — 1998. — Vol. 393. — Pp. 133–137.
70. *Hollenberg L. C. L., Greentree A. D., Fowler A. G., Wellard C. J.* Two-dimensional architectures for donor-based quantum computing // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74, no. 4. — P. 045311.
71. *Hamid E., Moraru D., Kuzuya Y., Mizuno T., Anh L. T., Mizuta H., Tabe M.* Electron-tunneling operation of single-donor-atom transistors at elevated temperatures // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 085420.
72. Transport spectroscopy of single phosphorus donors in a silicon nanoscale transistor / K. Y. Tan, K. W. Chan, M. Mottonen, A. Morello, C. Yang, J. v. Donkelaar, A. Alves, J.-M. Pirkkalainen, D. N. Jamieson et al. // *Nano Lett.* — 2010. — Vol. 10. — Pp. 11–15.
73. *Binnig G., Rohrer H.* Scanning tunneling microscopy // *Helv. Phys. Acta.* — 1982. — Vol. 55, no. 6. — Pp. 726–735.
74. *Вольф . .* Принципы электронной туннельной спектроскопии. — Киев: Наукова Думка, 1990. — 453 с.
75. *Ebert P.* Nano-scale properties of defects in compound semiconductor surfaces // *Surf. Sci. Rep.* — 1999. — Vol. 33. — Pp. 121–303.
76. *Tromp M.* Spectroscopy with the scanning tunneling microscope: a critical review // *Condens. Matter.* — 1989. — Vol. 1. — Pp. 10211–10228.
77. *Lang N. D.* Spectroscopy of single atoms in the scanning tunneling microscope // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34. — Pp. 5947–5958.

78. Zheng J. F., Liu X., Newman N., Weber E. R., Ogletree D. F., Salmeron M. Scanning tunneling microscopy studies of Si donors (si_{Ga}) in GaAs // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72, no. 10. — Pp. 1490–1493.
79. Ebert P., Zhang T., Kluge F., Simon M., Zhang Z., Urban K. Importance of Many-Body effects in the Clustering of Charged Zn dopant atoms in GaAs // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83, no. 4. — Pp. 757–760.
80. Zheng J. F., Salmeron M., Weber E. R. Empty state and filled state image of (Zn_{Ga}) acceptor in GaAs studied by scanning tunneling microscope // *Appl. Phys. Lett.* — 1994. — Vol. 64. — Pp. 1836–1838.
81. Wang J., Arias T. A., Joannopoulos J. D., Turner G. W., Alerhand O. L. Scanning-tunneling-microscopy signatures and chemical identifications of the (110) surface of Si-doped GaAs // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47, no. 16. — Pp. 10326–10334.
82. van der Wielen M. C., van Roij A. J., van Kempen H. Direct Observation of Friedel Oscillations around Incorporated SiGa Dopants in GaAs by Low-Temperature Scanning Tunneling Microscopy // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76, no. 7. — Pp. 1075–1078.
83. Marczinowski M. C., Wiebe J., Tang J. M., Flatte M. E., Meier F., Morgenstern M., Wiesendanger R. Local electronic structure near Mn acceptors in InAs: surface-induced symmetry breaking and coupling to host states // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 157202.
84. Loth S. and Wenderoth M., Ulbrich R. G. Asymmetry of acceptor wave functions caused by surface-related strain and electric field in InAs // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 115334.
85. Marczinowski M. C., Wiebe J., Hashimoto K., Meier, Wiesendanger R. Effect of charge manipulation on scanning tunneling spectra of single Mn acceptors in InAs // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 115318.
86. Kanisawa K., Butcher M. J., Tokura Y., Yamaguchi H., Hirayama Y. Local Density of States in Zero-Dimensional Semiconductor Structures // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 87, no. 19. — P. 196804.

87. Meyer C., Klijn J., Morgenstern M., Wiesendanger R. Direct Measurement of the Local Density of States of a Disordered One-Dimensional Conductor // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 7. — P. 076803.
88. Suzuki K., Kanisawa K., Janer C., Perraud S., Takashina K., Fujisawa T., Hirayama Y. Spatial imaging of two-dimensional electronic states in semiconductor quantum wells // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98. — P. 136802.
89. Madhavan V., Chen W., Jamneala T., Crommie M. F., Wingreen N. S. Local spectroscopy of a Kondo impurity: Co on Au(111) // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64, no. 16. — P. 165412.
90. Dombrowski R., Wittneven C., Morgenstern M., Wiesendanger R. Landau level quantization measured by scanning tunneling spectroscopy on n-InAs (110) // *Physica Status Solidi B.* — 1998. — Vol. 210, no. 2. — Pp. 845–851.
91. Inglesfield J., Boon M. H., Crampin S. Nature of Friedel oscillations around Si dopants in the GaAs (110) accumulation layer // *Condens. Matter.* — 2001. — Vol. 12. — Pp. L489–L496.
92. Depuydt A., Van Haesendonck C., Maslova N. S., Panov V. I., Savinov S. V., Arseev P. I. Scanning tunneling microscopy and spectroscopy at low temperatures of the (110) surface of Te-doped GaAs single crystals // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 60, no. 4. — Pp. 2619–2626.
93. Mahieu G., Grandidier B., Deresmes D., Nys J. P., Stiévenard D., Ebert P. Direct Evidence for Shallow Acceptor States with Nonspherical Symmetry in GaAs // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94, no. 2. — P. 026407.
94. Sullivan J. M., Boishin G. I., Whitman L. J., Hanbicki A. T., Jonker B. T., Erwin S. C. Cross-sectional scanning tunneling microscopy of Mn-doped GaAs: Theory and experiment // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68, no. 23. — P. 235324.
95. Lu J. Q., Johnson H. T., Dasika V. D., Goldman R. S. Moments-based tight-binding calculations of local electronic structure in InAs/GaAs quan-

- tum dots for comparison to experimental measurements // *Appl. Phys. Lett.* — 2006. — Vol. 88, no. 5. — Pp. 1–3.
96. *Sellier H., Lansbergen G. P., Caro J., Rogge S., Collaert N., Ferain I., Jurczak M., Biesemans S.* Transport spectroscopy of a single dopant in a gated silicon nanowire // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 97, no. 20. — P. 206805.
 97. *Calvet L. E., Snyder J. P., Wernsdorfer W.* Excited-state spectroscopy of single Pt atoms in Si // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 78, no. 19. — P. 195309.
 98. *Calvet L. E., Wheeler R. G., Reed M. A.* Observation of the linear stark effect in a single acceptor in Si // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98, no. 9. — P. 096805.
 99. *Molotkov S. N., Nazin S. S., Smirnova I. S., Tatarski V. V.* Theory of scanning tunneling spectroscopy - application to Si(100) 2×1 surface // *Surface Science.* — 1991. — Vol. 259. — Pp. 339–350.
 100. *Yokoyama T., Takayanagi K.* Size quantization of surface-state electrons on the Si(001) surface // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59, no. 19. — Pp. 12232–12235.
 101. *Li J., Schneider W.-D., Berndt R., Crampin S.* Electron confinement to nanoscale Ag islands on Ag(111): A quantitative study // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80, no. 15. — Pp. 3332–3335.
 102. *McEuen P. L., Foxman E. B., Meirav U., Kastner M. A., Meir Y., Wingreen N. S., Wind S. J.* Transport spectroscopy of a Coulomb island in the quantum Hall regime // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Vol. 66, no. 14. — Pp. 1926–1929.
 103. *Foxman E. B., McEuen P. L., Meirav U., Wingreen N. S., Meir Y., Belk P. A., Belk N. R., Kastner M. A., Wind S. J.* Effects of quantum levels on transport through a Coulomb island // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47, no. 15. — Pp. 10020–10023.
 104. *Nakatsuji K., Takagi Y., Komori F., Kusunohara H., Ishii A.* Electronic states of the clean Ge(001) surface near Fermi energy // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72, no. 24. — P. 241308.

105. *Sagisaka K., Fujita D.* Standing waves on Si(100) and Ge(100) surfaces observed by scanning tunneling microscopy // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72, no. 23. — P. 235327.
106. *Einaga Y., Hirayama H., Takayanagi K.* Role of 2×1 domain boundaries on the transition from 2×1 to $c(2 \times 8)$ at Ge(111) surfaces // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 57, no. 24. — Pp. 15567–15571.
107. *Arseyev P., Maslova N. S., Panov V. I., Savinov S. V., van Hae-sendonk C.* Bias voltage dependent shift of the atomic-scale structure of the Ge(111) – (2×1) reconstructed surface measured by the low temperature scanning tunneling microscopy // *JETP Lett.* — 2007. — Vol. 85, no. 6. — Pp. 277–282.
108. *Garleff J. K., Wenderoth M., Sauthoff K., Ulbrich R. G., Rohlfing M.* 2×1 reconstructed Si(111) surface: STM experiments versus *ab initio* calculations // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70, no. 24. — P. 245424.
109. *Chadi D. J.* Stabilities of single-layer and bilayer steps on Si(001) surfaces // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59, no. 15. — Pp. 1691–1694.
110. *Bena C.* Effect of a single localized impurity on the local density of states in monolayer and bilayer graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100. — P. 076601.
111. *Sivan N., Wingreen N. S.* Single-impurity Anderson model out of equilibrium // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54. — Pp. 11622–11629.
112. *Wingreen N. S., Jauho A.-P., Meir Y.* Time-dependent transport through a mesoscopic structure // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48, no. 11. — Pp. 8487–8490.
113. *Zheng-zhong Li Y. R., Xiao M., Hu A.* Microscopic study of impurity resonance and tunneling magnetoresistance of nanoscale junctions // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 054420.
114. *Schneider I., Struck A., Bortz M., Eggert S.* Local density of states for individual energy levels in finite quantum wires // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 206401.

115. *Mugarza A., Robles R., Krull C., Korytar R., Lorente N., Gambardella P.* Electronic and magnetic properties of molecule-metal interfaces: Transition-metal phthalocyanines adsorbed on Ag(100) // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 85. — P. 155437.
116. *Qian M. C., Göthelid M., Johansson B., Mirbt S.* Atomic and electronic properties of anion vacancies on the (110) surfaces of InP, InAs, and InSb // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66, no. 15. — P. 155326.
117. *Savinov S. V., Oreshkin S., Maslova N. S.* Electronic structure of Ge(111)–(2×1) surface in the presence of doping atoms. ab initio analysis of STM data // *Pis'ma ZhETF.* — 2011. — Vol. 93, no. 9. — Pp. 579–583.
118. *Savinov S. V., Oreshkin A., Oreshkin S.* Ab initio electronic structure of Ge(111) – (2 × 1) surface in the presence of surface vacancy. application to STM data analysis // *Pis'ma ZhETF.* — 2012. — Vol. 96, no. 1. — Pp. 33–36.
119. *Savinov S. V., Oreshkin A., Oreshkin S.* Ab initio study of surface electronic structure of phosphorus donor impurity on Ge(111) – (2 × 1) surface // *Pis'ma ZhETF.* — 2013. — Vol. 97, no. 7. — Pp. 458–464.
120. *Uspenskii Y. A., Kulatov E., Titov A., Tikhonov E., Michelini F., Raymond L.* Electronic and magnetic properties of semiconducting nanoclusters and large organic molecules: Features interesting for spintronics // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 2012. — Vol. 324, no. 21. — Pp. 3597–3600.
121. *Uspenskii Y. A., Kulatov E., Titov A., Tikhonov E., Michelini F., Raymond L.* Electronic, optical spectra and the distribution of Mn impurities in GaN and group-IV semiconductors // *Journal of Crystal Growth.* — 2005. — Vol. 275, no. 1-2. — Pp. E2239–E2243.
122. *Pereira V., Nilsson J., Castro-Neto A. H.* Coulomb impurity problem in graphene // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 166802.
123. *Schollwock U.* The density-matrix renormalization group // *Rev. Mod. Phys.* — 2005. — Vol. 77, no. 1. — Pp. 259–315.
124. *Fano U.* Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 124. — Pp. 1866–1878.

125. *Ujsaghy O., Kroha J., Szunyogh L., Zawadowski A.* Theory of the Fano resonance in the STM tunneling density of states due to a single Kondo impurity // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85. — Pp. 2557–2560.
126. *Schiller A., Hershfield S.* Theory of scanning tunneling spectroscopy of a magnetic adatom on a metallic surface // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — Pp. 9036–9046.
127. *Konig J., Schoeller H., Schon G.* Zero-bias anomalies and boson-assisted tunneling through quantum dots // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76. — Pp. 1715–1718.
128. *Tekman E., Bagwell P. F.* Fano resonances in quasi-one-dimensional electron waveguides // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48. — Pp. 2553–2559.
129. *Gores J., Goldhaber-Gordon D., Heemeyer S., Kastner M. A., Shtrikman H., Mahalu D., Meirav U.* Fano resonances in electronic transport through a single-electron transistor // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 2188–2194.
130. *Anderson P. W.* Localized magnetic states in metals // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 124. — Pp. 41–53.
131. *Madhavan V., Chen W., Jamneala T., Crommie M., Wingreen N.* Tunneling into a single magnetic atom: spectroscopic evidence of Kondo resonance // *Science.* — 1998. — Vol. 280. — Pp. 567–569.
132. *Manoharan H., Lutz C., Eigler D.* Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure // *Nature.* — 2000. — Vol. 403. — Pp. 512–515.
133. *Breit G., Wigner E.* Capture of slow neutrons // *Phys. Rev.* — 1936. — Vol. 49. — Pp. 519–531.
134. *Berthod C., Giamarchi T.* Tunneling conductance and local density of states in tight-binding junctions // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 155414.
135. *Meir Y., Wingreen N. S., Lee P. A.* Low-temperature transport through a quantum dot: The Anderson model out of equilibrium // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 70. — Pp. 2601–2604.

136. *Fulton T. A., Dolan G. J.* Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 109–112.
137. *Ng T. K., Lee P. A.* On-site coulomb repulsion and resonant tunneling // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61. — Pp. 1768–1771.
138. *Glazman L. I., Raikh M. E.* Resonant Kondo transparency of a barrier with quasilocal impurity states // *JETP Lett.* — 1988. — Vol. 47. — Pp. 452–455.
139. *Nockel J. U., Stone A. D.* Resonance line shapes in quasi-one-dimensional scattering // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50. — Pp. 17415–17432.
140. *Chu C. S., Sorbello R. S.* Effect of impurities on the quantized conductance of narrow channels // *Phys. Rev. B.* — 1989. — Vol. 40. — Pp. 5941–5949.
141. *Wingreen N. S., Jacobsen K. W., Wilkins J. W.* Resonant tunneling with electron-phonon interaction: An exactly solvable model // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 61. — Pp. 1396–1399.
142. *Imam H. T., Ponomarenko V. V., Averin D. V.* Coulomb blockade of resonant tunneling // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50. — Pp. 18288–18298.
143. *Hofstetter W., König J., Schoeller H.* Kondo correlations and the Fano effect in closed Aharonov-Bohm interferometers // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 87. — P. 156803.
144. *Arseyev P., Maslova N. S., Panov V. I., Savinov S. V.* Non-equilibrium tunneling effects of interacting hubbard-anderson impurities // *JETP.* — 2002. — Vol. 121, no. 1. — Pp. 225–234.
145. *Goldin Y., Avishai Y.* Nonlinear response of a Kondo system: Perturbation approach to the time-dependent Anderson impurity model // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 61. — Pp. 16750–16772.
146. *Jauho A.-P., Wingreen N. S., Meir Y.* Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50. — Pp. 5528–5544.

147. *Meir Y., Wingreen N. S., Lee P. A.* Transport through a strongly interacting electron system: Theory of periodic conductance oscillations // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Vol. 66. — Pp. 3048–3051.
148. *Averin D. V., Korotkov A. N., Nazarov Y. V.* Transport of electron-hole pairs in arrays of small tunnel junctions // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Vol. 66. — Pp. 2818–2821.
149. *Ruzin I. M., Chandrasekhar V., Levin E. I., Glazman L. I.* Stochastic Coulomb blockade in a double-dot system // *Phys. Rev. B.* — 1992. — Vol. 45. — Pp. 13469–13478.
150. *Kikoin K., Avishai Y.* Kondo tunneling through real and artificial molecules // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 86. — Pp. 2090–2093.
151. *Waugh F. R., Berry M. J., Crouch C. H., Livermore C., Mar D. J., Westervelt R. M., Campman K. L., Gossard A. C.* Measuring interactions between tunnel-coupled quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 53. — Pp. 1413–1420.
152. *Maslova N. S.* Tunneling from localized surface states of semiconductor with Coulomb correlations // *JETP Lett.* — 1990. — Vol. 51. — Pp. 712–715.
153. *Glazman L. I., Matveev K. A.* Coulomb correlations in the tunneling through resonance centers // *JETP Lett.* — 1988. — Vol. 48. — Pp. 445–448.
154. *Kuznetsov V. V., Savchenko A. K., Mace D. R., Linfield E. H., Ritchie D. A.* Resonant tunneling spectroscopy of interacting localized states: Observation of the correlated current through two impurities // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 56. — Pp. R15533–R15536.
155. *Feigel'man M. V., Ioselevich A. S.* Variable range cotunneling and conductivity of a granular metal // *JETP Lett.* — 2005. — Vol. 81. — Pp. 341–347.
156. *Beloborodov I. S., Lopatin A. V., Vinokur V. M., Efetov K. B.* Granular electronic systems // *Rev. Mod. Phys.* — 2007. — Vol. 79. — Pp. 469–518.

157. *Arseyev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N.* Correlation induced switching of local spatial charge distribution in two-level system // *JETP Lett.* — 2011. — Vol. 94, no. 5. — Pp. 58–62.
158. *Konig J., Gefen Y.* Nonmonotonic charge occupation in double dots // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 201308.
159. *Levy Yeyati A., Buttiker M.* Scattering phases in quantum dots: An analysis based on lattice models // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 7307–7315.
160. *Pou P., Perez R., Flores F., Yeyati A. L., Martin-Rodero A., Blanco J. M., Garcia-Vidal F. J., Ortega J.* Local-density approach and quasiparticle levels for generalized Hubbard Hamiltonians // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 4309–4331.
161. *Verges J. A., Cuevas E., Ortuno M., Louis E.* Chaotic behavior induced by point contacts in quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 1998. — Vol. 58. — Pp. R10143–R10146.
162. *Kohn W., Sham L. J.* Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Phys. Rev.* — 1965. — Vol. 140. — Pp. A1133–A1138.
163. *Hohenberg P., Kohn W.* Inhomogeneous electron gas // *Phys. Rev.* — 1964. — Vol. 136. — Pp. B864–B871.
164. *Georges A., Kotliar G., Krauth W., Rozenberg M. J.* Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions // *Rev. Mod. Phys.* — 1996. — Vol. 68. — Pp. 13–125.
165. *Vamivakas A. N., Lu C.-Y., Matthiesen C., Zhao Y., Falt S., Badolato A., Atatüre M.* Observation of spin-dependent quantum jumps via quantum dot resonance fluorescence // *Nature.* — 2010. — Vol. 467. — Pp. 297–300.
166. *Stinaff E. A., Scheibner M., Bracker A. S., Ponomarev I. V., Korenev V. L., Ware M. E., Doty M. F., Reinecke T., Gammon D.* Optical signatures of coupled quantum dots // *Science.* — 2006. — Vol. 311. — Pp. 636–639.
167. *Elzerman J. M., Weiss K. M., Miguel-Sanchez J., Imamoglu A.* Optical amplification using raman transitions between spin-singlet and spin-triplet

- states of a pair of coupled In-GaAs quantum dots // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 107. — P. 017401.
168. Charge control in laterally coupled double quantum dots / G. Munoz-Matutano, M. Royo, J. I. Climente, J. Canet-Ferrer, D. Fuster, P. Alonso-Gonzalez, I. Fernandez-Martinez, J. Martinez-Pastor, Y. Gonzalez et al. // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 041308.
169. *Evtikhiev V. P., Tokranov V. E., Kryzhanovskii A. K., Boiko A. M., Suris R. A., Titkov A. N., Nakamura A., Ichida M.* Growth of InAs quantum dots on vicinal GaAs(001) surfaces misoriented in the [010] direction // *Semiconductors.* — 1998. — Vol. 32. — Pp. 765 – 769.
170. *Uspenskii Y., Ivanov O., Kulatov E., Rubtsov A., Matsko N., Baturin V., Arseev P.* Multiscale simulation of the electronic structure of silicon nanoclusters // *Bulletin of the Lebedev Physics Institute.* — 2013. — Vol. 40. — Pp. 132–135.
171. *Kikoin K., Avishai Y.* Double quantum dot as a spin rotator // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 115329.
172. *Peng J., Bester G.* Charged excitons and biexcitons in laterally coupled (In,Ga)As quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 82. — P. 235314.
173. *Szafran B., Peeters F. M.* Signatures of lateral coupling of double quantum dots in the exciton photoluminescence spectrum // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 76. — P. 195442.
174. *Wang L.-W., Zunger A.* Linear combination of bulk bands method for large-scale electronic structure calculations on strained nanostructures // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59. — Pp. 15806–15818.
175. *Orellana P. A., Lara G. A., Anda E. V.* Kondo effect and bistability in a double quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 155317.
176. *Lozovik Y., Ruvinsky A.* Transport of magnetoexcitons in single and coupled quantum wells // *Physica Scripta.* — 1998. — Vol. 58. — Pp. 90–96.
177. *Lozovik Y., Kaputkina N.* Quantum dot molecule // *Physica Scripta.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. 542–544.

178. *Paaske J., Rosch A., Wolfle P.* Nonequilibrium transport through a Kondo dot in a magnetic field: Perturbation theory // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69. — P. 155330.
179. *Paaske J., Rosch A., Kroha J., Wolfle P.* Nonequilibrium transport through a Kondo dot: Decoherence effects // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70. — P. 155301.
180. *Kaminski A., Nazarov Y. V., Glazman L. I.* Universality of the Kondo effect in a quantum dot out of equilibrium // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 8154–8170.
181. *Pohjola T., Konig J., Salomaa M., Schmid J., Schoeller H., Schon G.* Resonant tunneling through a two-level dot and double quantum dots // *Europhys. Lett.* — 1997. — Vol. 40. — Pp. 189–195.
182. *Tanaka Y., Kawakami N.* Spin-polarized transport through double quantum dots // *J. Phys. Soc. Jpn.* — 2004. — Vol. 73. — Pp. 2795–2801.
183. *Coleman P.* New approach to the mixed-valence problem // *Phys. Rev. B.* — 1984. — Vol. 29. — Pp. 3035–3044.
184. *Coleman P.* Mixed valence as an almost broken symmetry // *Phys. Rev. B.* — 1987. — Vol. 35. — Pp. 5072–5116.
185. *Bickers N. E.* Review of techniques in the large- n expansion for dilute magnetic alloys // *Rev. Mod. Phys.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 845–939.
186. *Wingreen N. S., Meir Y.* Anderson model out of equilibrium: Noncrossing-approximation approach to transport through a quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 49. — Pp. 11040–11052.
187. *Golovach V. N., Loss D.* Transport through a double quantum dot in the sequential tunneling and cotunneling regimes // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69. — P. 245327.
188. *Hornberger R., Koller S., Begemann G., Donarini A., Grifoni M.* Transport through a double-quantum-dot system with noncollinearly polarized leads // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 245313.

189. *Weymann I.* Spin-polarized transport through weakly coupled double quantum dots in the Coulomb-blockade regime // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 195339.
190. *Fransson J.* Formation of pure two-electron triplet states in weakly coupled quantum dots attached to ferromagnetic leads // *Nanotechnology.* — 2006. — Vol. 17. — Pp. 5344–5348.
191. *Wunsch B., Braun M., König J., Pfannkuche D.* Probing level renormalization by sequential transport through double quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 205319.
192. *Liu H. W., Fujisawa T., Hayashi T., Hirayama Y.* Pauli spin blockade in cotunneling transport through a double quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 161305.
193. *Blumenthal M. D., Kaestner B., Li L., Giblin S., Janssen T. J. B. M., Pepper M., Anderson D., Jones G., Ritchie D. A.* Gigahertz quantized charge pumping // *Nature Physics.* — 2007. — Vol. 3. — Pp. 343–347.
194. *Geerligs L. J., Anderegg V. F., Holweg P. A. M., Mooij J. E., Pothier H., Esteve D., Urbina C., Devoret M. H.* Frequency-locked turnstile device for single electrons // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 64. — Pp. 2691–2694.
195. *Keller M. W., Martinis J. M., Zimmerman N. M., Steinbach A. H.* Accuracy of electron counting using a 7-junction electron pump // *Appl. Phys. Lett.* — 1996. — Vol. 69. — Pp. 1804–1806.
196. *Altshuler B. L., Glazman L. I.* Pumping electrons // *Science.* — 1999. — Vol. 283. — Pp. 1864–1865.
197. *Switkes M., Marcus C. M., Campman K., Gossard A. C.* An adiabatic quantum electron pump // *Science.* — 1999. — Vol. 283. — Pp. 1905–1908.
198. Single-parameter nonadiabatic quantized charge pumping / B. Kaestner, V. Kashcheyevs, S. Amakawa, M. D. Blumenthal, L. Li, T. J. B. M. Janssen, G. Hein, K. Pierz, T. Weimann et al. // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 77. — P. 153301.
199. *Thouless D. J.* Quantization of particle transport // *Phys. Rev. B.* — 1983. — Vol. 27. — Pp. 6083–6087.

200. *Pothier H., Lafarge P., Urbina C., Esteve D., M.H. D.* Single-electron pump based on charging effects // *Europhys. Lett.* — 1992. — Vol. 17. — Pp. 249–254.
201. *Stoof T. H., Nazarov Y. V.* Time-dependent resonant tunneling via two discrete states // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 53. — Pp. 1050–1053.
202. *Covington M., Keller M. W., Kautz R. L., Martinis J. M.* Photon-assisted tunneling in electron pumps // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84. — Pp. 5192–5195.
203. *Brune P., Bruder C., Schoeller H.* Photon-assisted transport through ultrasmall quantum dots: Influence of intradot transitions // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 56. — Pp. 4730–4736.
204. *Stafford C. A., Wingreen N. S.* Resonant photon-assisted tunneling through a double quantum dot: An electron pump from spatial Rabi oscillations // *Phys. Rev. Lett.* — 1996. — Vol. 76. — Pp. 1916–1919.
205. *Hazelzet B. L., Wegewijs M. R., Stoof T. H., Nazarov Y. V.* Coherent and incoherent pumping of electrons in double quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 63. — P. 165313.
206. *Cota E., Aguado R., Platero G.* ac-driven double quantum dots as spin pumps and spin filters // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 94. — P. 107202.
207. *Splettstoesser J., Governale M., König J., Fazio R.* Adiabatic pumping through interacting quantum dots // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95. — P. 246803.
208. *Pekola J. P., Vartiainen J. J., Mottonen M., Saira O.-P., Meschke M., Averin D. V.* Hybrid single-electron transistor as a source of quantized electric current // *Nature Physics.* — 2008. — Vol. 4. — Pp. 120–124.
209. *Averin D. V., Pekola J. P.* Nonadiabatic charge pumping in a hybrid single-electron transistor // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 066801.
210. *Maisi V. F., Pashkin Y. A., Kafanov S., Tsai J.-S., Pekola J. P.* Parallel pumping of electrons // *New Journal of Phys.* — 2009. — Vol. 11. — P. 113057.

211. *Renzoni F., Brandes T.* Charge transport through quantum dots via time-varying tunnel coupling // *Phys. Rev. B.* — 2001. — Vol. 64. — P. 245301.
212. *Moskalets M., Buttiker M.* Floquet scattering theory of quantum pumps // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 205320.
213. *Molotkov S. N.* Quantum controlled - NOT gate based on a single quantum dot // *JETP Lett.* — 1996. — Vol. 64. — Pp. 237–433.
214. *Collier C. P., Wong E. W., Belohradsky M., Raymo F. M., Stoddart J. F., Kuekes P. J., Williams R. S., Heath J. R.* Electronically configurable molecular-based logic gates // *Science.* — 1999. — Vol. 285. — Pp. 391–394.
215. *Gittins D. I., Bethell D., Schiffrin D. J., Nichols R. J.* A nanometre-scale electronic switch consisting of a metal cluster and redox-addressable groups // *Nature.* — 2000. — Vol. 408. — Pp. 67–69.
216. *Kastner M. A.* The single-electron transistor // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — Pp. 849–858.
217. *Ashoori R. C.* Electrons in artificial atoms // *Nature.* — 1996. — Vol. 379. — Pp. 413–419.
218. *Oosterkamp T. H., Fujisawa T., van der Wiel W. G., Ishibashi K., Hijman R. V., Tarucha S., Kouwenhoven L. P.* Microwave spectroscopy of a quantum-dot molecule // *Nature.* — 1998. — Vol. 395. — Pp. 873–976.
219. *Blick R. H., van der Weide D. W., Haug R. J., Eberl K.* Complex broadband millimeter wave response of a double quantum dot: Rabi oscillations in an artificial molecule // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81. — Pp. 689–692.
220. *Lievermore C., Crouch C., Westervelt R. M., Campman K. L., Gosard A. C.* The Coulomb blockade in coupled quantum dots // *Science.* — 1996. — Vol. 274. — Pp. 1332–1335.
221. *Rotter I., Sadreev A. F.* Avoided level crossings, diabatic points, and branch points in the complex plane in an open double quantum dot // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71. — P. 036227.

222. *Goldman V. J., Tsui D. C., Cunningham J. E.* Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling structures // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — Pp. 1256–1259.
223. *Asryan L. V., Suris R. A.* Inhomogeneous line broadening and the threshold current density of a semiconductor quantum laser // *Semiconductor science and technology.* — 1996. — Vol. 11. — Pp. 554 – 567.
224. *Morozova E. N., Volkov V. A., Portal J.-C.* Giant tunnel magnetoresistance in double quantum well structures under an in-plane magnetic field // *J. of Physics Conference Series.* — 2013. — Vol. 456. — P. UNSP 012029.
225. *Waugh F. R., Berry M. J., Mar D. J., Westervelt R. M., Campman K. L., Gossard A. C.* Single-electron charging in double and triple quantum dots with tunable coupling // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75. — Pp. 705–708.
226. *Blick R. H., Haug R. J., Weis J., Pfannkuche D., Klitzing K. v., Eberl K.* Single-electron tunneling through a double quantum dot: The artificial molecule // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 53. — Pp. 7899–7902.
227. *Stafford C. A., Das Sarma S.* Collective Coulomb blockade in an array of quantum dots: A Mott-Hubbard approach // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72. — Pp. 3590–3593.
228. *Matveev K. A., Glazman L. I., Baranger H. U.* Coulomb blockade of tunneling through a double quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54. — Pp. 5637–5646.
229. *Angus S. J., Ferguson A. J., Dzurak A. S., Clark R. G.* Gate-defined quantum dots in intrinsic silicon // *Nano Lett.* — 2007. — Vol. 7. — Pp. 2051–2055.
230. *Grove-Rasmussen K., Jorgensen H. I., Hayashi T., Lindelof R. P. E., Fujisawa T.* A triple quantum dot in a single-wall carbon nanotube // *Nano Lett.* — 2008. — Vol. 8. — Pp. 1055–1060.
231. *Moriyama S., Tsuya D., Watanabe E., Uji S., Shimizu M., Mori T., Yamaguchi T., Ishibashi K.* Coupled quantum dots in a graphene-based two-dimensional semimetal // *Nano Lett.* — 2009. — Vol. 9. — Pp. 2891–2896.

232. *Landauer R.* Minimal energy requirements in communication // *Science*. — 1996. — Vol. 272. — Pp. 1914–1918.
233. *Loss D., DiVincenzo D. P.* Quantum computation with quantum dots // *Phys. Rev. A*. — 1998. — Vol. 57. — Pp. 120–126.
234. *van der Wiel W. G., De Franceschi S., Elzerman J. M., Fujisawa T., Tarucha S., Kouwenhoven L. P.* Electron transport through double quantum dots // *Rev. Mod. Phys.* — 2002. — Vol. 75. — Pp. 1–22.
235. *Filippone M., Le Hur K., Mora C.* Giant charge relaxation resistance in the Anderson model // *Phys. Rev. Lett.* — 2011. — Vol. 107. — P. 176601.
236. *Bacher G., Weigand R., Seufert J., Gippius N., Kulakovskii V., Forchel A., Leonardi K., Hommel D.* Dynamics of excitons and biexcitons in one single quantum dot // *Phys. Stat. Solidi B*. — 2000. — Vol. 221. — Pp. 25–29.
237. *Fève G., Mahe A., Berroir J.-M., Kontos T., Placais B., Glattli D. C., Cavanna A., Etienne B., Jin Y.* An on-demand coherent single-electron source // *Science*. — 2007. — Vol. 316. — Pp. 1169–1172.
238. *Lee M., Lopez R., Choi M.-S., Jonckheere T., Martin T.* Effect of many-body correlations on mesoscopic charge relaxation // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 83. — P. 201304.
239. *Reckermann F., Splettstoesser J., Wegewijs M. R.* Interaction-induced adiabatic nonlinear transport // *Phys. Rev. Lett.* — 2010. — Vol. 104. — P. 226803.
240. *Hayashi T., Fujisawa T., Cheong H. D., Jeong Y. H., Hirayama Y.* Coherent manipulation of electronic states in a double quantum dot // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91. — P. 226804.
241. *Bar-Joseph I., Gurvitz S. A.* Time-dependent approach to resonant tunneling and inelastic scattering // *Phys. Rev. B*. — 1991. — Vol. 44. — Pp. 3332–3335.
242. *Gurvitz S. A., Marinov M. S.* Two-exponential decay from a double-well potential // *Phys. Rev. A*. — 1989. — Vol. 40. — Pp. 2166–2169.

243. *Gurvitz S. A., Kalbermann G.* Decay width and the shift of a quasistationary state // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 262–265.
244. *Tsuchiya M., Matsusue T., Sakaki H.* Tunneling escape rate of electrons from quantum well in double-barrier heterostructures // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 2356–2359.
245. *Contreras-Pulido L. D., Splettstoesser J., Governale M., König J., Büttiker M.* Time scales in the dynamics of an interacting quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 85. — P. 075301.
246. *Alexandrov A. S., Bratkovsky A. M., Williams R. S.* Bistable tunneling current through a molecular quantum dot // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 075301.
247. *Rack A., Wetzler R., Wacker A., Schöll E.* Dynamical bistability in quantum-dot structures: Role of Auger processes // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 165429.
248. *Djuric I., Search C. P.* Bistable spin currents from quantum dots embedded in a microcavity // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 75. — P. 155307.
249. *Chan I. H., Fallahi P., Vidan A., Westervelt R. M., Hanson M., Gossard A. C.* Few-electron double quantum dots // *Nanotechnology.* — 2004. — Vol. 15. — Pp. 609–613.
250. *Hammack A. T., Gippius N., Yang S., Andreev G. O., Butov L., Hanson M., Gossard A. C.* Excitons in electrostatic traps // *Journal of Applied Physics.* — 2006. — Vol. 99. — P. 066104.
251. *Hummon M. R., Stollenwerk A. J., Narayanamurti V., Anikeeva P. O., Panzer M. J., Wood V., Bulović V.* Measuring charge trap occupation and energy level in CdSe/ZnS quantum dots using a scanning tunneling microscope // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 115439.
252. *Pioro-Ladriere M., Abolfath M. R., Zawadzki P., Lapointe J., Studenikin S. A., Sachrajda A. S., Hawrylak P.* Charge sensing of an artificial h_2^+ molecule in lateral quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 125307.

253. *Pujari B. S., Joshi K., Kanhere D. G., Blundell S. A.* Impurity effects on the electronic structure of square quantum dots: A full configuration-interaction study // *Phys. Rev. B.* — 2008. — Vol. 78. — P. 125414.
254. *Comas F., Studart N.* Electron-phonon interaction in quantum-dot/quantum-well semiconductor heterostructures // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69. — P. 235321.
255. *Keil M., Schoeller H.* Nonperturbative analysis of coupled quantum dots in a phonon bath // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66. — P. 155314.
256. *Zhu J.-X., Balatsky A. V.* Theory of current and shot-noise spectroscopy in single-molecular quantum dots with a phonon mode // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 165326.
257. *Ortner G., Oulton R., Kurtze H., Schwab M., Yakovlev D. R., Bayer M., Fafard S., Wasilewski Z., Hawrylak P.* Energy relaxation of electrons in InAs/GaAs quantum dot molecules // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 165353.
258. *Tikhodeev S. G., Ueba H.* Relation between inelastic electron tunneling and vibrational excitation of single adsorbates on metal surfaces // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 70. — P. 125414.
259. *Mii T., Tikhodeev S. G., Ueba H.* Spectral features of inelastic electron transport via a localized state // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 68. — P. 205406.
260. *Arseev P. I., Maslova N. S.* Electron-vibration interaction in tunneling processes through single molecules // *Physics-Uspekhi.* — 2010. — T. 53. — C. 1151–1169.
261. *Arseyev P. I., Maslova N. S.* Effects of electron-phonon interaction in tunneling processes in nanostructures // *JETP Lett.* — 2005. — Vol. 82. — Pp. 297–301.
262. *Arseyev P. I., Maslova N. S.* Electron interaction with vibrational modes in tunneling through a single molecular electronic level // *JETP Lett.* — 2007. — Vol. 85. — Pp. 251–256.

263. *Bockelmann U.* Phonon scattering between zero-dimensional electronic states: Spatial versus Landau quantization // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 50. — Pp. 17271–17279.
264. *Wu Z.-J., Zhu K.-D., Yuan X.-Z., Jiang Y.-W., Zheng H.* Charge qubit dynamics in a double quantum dot coupled to phonons // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 205323.
265. *Stavrou V. N., Hu X.* Charge decoherence in laterally coupled quantum dots due to electron-phonon interactions // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 72. — P. 075362.
266. *Climente J. I., Bertoni A., Goldoni G., Molinari E.* Phonon-induced electron relaxation in weakly confined single and coupled quantum dots // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 035313.
267. *Zanardi P., Rossi F.* Subdecoherent information encoding in a quantum-dot array // *Phys. Rev. B.* — 1999. — Vol. 59. — Pp. 8170–8181.
268. *Mantsevich V. N., Maslova N. S.* Spatial distribution of local density of states in vicinity of impurity on semiconductor surface // *JETP Lett.* — 2009. — Vol. 89, no. 12. — Pp. 609–613.
269. *Muzychenko D. A., Savinov S. V., Mantsevich V. N., Maslova N. S., Panov V. I., Schouteden K., Haesendonk K. v.* Low-temperature scanning tunneling microscopy and spectroscopy of spatial oscillations in the density of states near domain boundaries at the Ge(111) surface // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 035313.
270. *Mantsevich V. N., Maslova N. S.* Spatial effects of Fano resonance in local tunneling conductivity in vicinity of impurity on semiconductor surface // *JETP Lett.* — 2010. — Vol. 91, no. 3. — Pp. 139–142.
271. *Mantsevich V. N., Maslova N. S.* Different behavior of local tunneling conductivity for deep and shallow impurities due to Coulomb interaction // *Solid State Comm.* — 2010. — Vol. 150, no. 41-42. — Pp. 2072–2075.
272. *Mantsevich V. N., Maslova N. S.* The influence of tunneling matrix element modification due to on-site Coulomb interaction on local tunneling conductivity // *Solid State Comm.* — 2011. — Vol. 151, no. 9. — Pp. 659–662.

273. Schwarz A., Allers W., Schwarz U. D., Wiesendanger R. Detection of doping atom distributions and individual dopants in InAs(110) by dynamic-mode scanning force microscopy in ultrahigh vacuum // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — Pp. 13617–13622.
274. Maslova N. S., Panov V. I., Savinov S. V., Depuyt A., van Haesendonk C. Scanning tunneling spectroscopy of charge effects on semiconductor surfaces and atomic clusters // *JETP Lett.* — 1998. — Vol. 67, no. 2. — Pp. 130–135.
275. Feenstra R. M., Meyer G., Moresco F., Rieder K. H. Low-temperature scanning tunneling spectroscopy of n-type GaAs(110) surfaces // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 66, no. 16. — P. 165204.
276. Oreshkin A. I., Mancevich V. N., Maslova N. S., Muzychenko D. A., Oreshkin S. I., Panov V. I., Savinov S. V., Oreshkin S. I., Arseev P. I. The influence of different impurity atoms on $1/f^\alpha$ tunneling current noise characteristics on InAs (110) surface // *JETP Lett.* — 2007. — Vol. 85, no. 1. — Pp. 40–45.
277. Mantsevich V. N., Maslova N. S., Oreshkin A. I., Oreshkin S. I., Muzychenko D. A., Panov V. I., Savinov S. V. Effect of localized charge states on the low-frequency part of the tunneling current spectrum ($1/f^\alpha$) // *Bulletin of the Russian academy of science: physics.* — 2009. — Vol. 73, no. 7. — Pp. 886–888.
278. Mantsevich V. N., Maslova N. S. The influence of localized state charging on $1/f^\alpha$ tunneling current noise spectrum // *Solid. St. Commun.* — 2008. — Vol. 147. — Pp. 278–283.
279. Mantsevich V. N., Maslova N. S. Tuning of tunneling current noise spectra singularities by localized states charging // *JETP Lett.* — 2009. — Vol. 89, no. 1. — Pp. 24–29.
280. Chen C. J. Tunneling matrix elements in three-dimensional space: The derivative rule and the sum rule // *Phys. Rev. B.* — 1990. — Vol. 42, no. 14. — Pp. 8841–8857.
281. Chen C. J. Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning

- tunneling microscopy // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 65, no. 4. — Pp. 448–451.
282. *Feigel'man M. V., Ioselevich A. S.* Inelastic cotunneling through a long diffusive wire // *JETP Lett.* — 2008. — Vol. 88. — Pp. 767–771.
283. *Arseev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N.* The effect of Coulomb correlations on the nonequilibrium charge redistribution tuned by a tunneling current // *JETP.* — 2012. — Vol. 115, no. 1. — Pp. 141–153.
284. *Arseyev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N.* Charge and spin configurations in the coupled quantum dots with Coulomb correlations induced by tunneling current // *European Physical Journal B.* — Vol. 85, no. 11. — P. 410.
285. *Arseyev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N.* Coulomb correlations effects on localized charge relaxation in the coupled quantum dots // *European Physical Journal B.* — Vol. 85, no. 7. — P. 249.
286. *Arseev P. I., Maslova N. S., Mantsevich V. N.* Non-adiabatic electron charge pumping in coupled semiconductor quantum dots // *JETP Lett.* — 2012. — Vol. 95, no. 10. — Pp. 521–527.
287. *Nielsen E., Barnes E., Kestner J. P., Das Sarma S.* Six-electron semiconductor double quantum dot qubits // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 88. — P. 195131.
288. *Lim W. H., Yang C. H., Zwanenburg F. A., Dzurak A. S.* Spin-filling of valley-orbit states in a silicon quantum dot // *Nanotechnology.* — 2011. — Vol. 22. — P. 335704.
289. *Mantsevich V. N., Maslova N. S., Arseyev P. I.* Localized charge bifurcation in the coupled quantum dots // *Solid State Comm.* — 2012. — Vol. 152, no. 16. — Pp. 1545–1550.
290. *Mantsevich V. N., Maslova N. S., Arseyev P. I.* Charge trapping in the system of interacting quantum dots // *Solid State Comm.* — 2013. — Vol. 168. — Pp. 36–41.
291. *Mantsevich V. N., Maslova N. S., Arseyev P. I.* Non-stationary effects in the coupled quantum dots influenced by the electron-phonon interaction // *JETP Lett.* — 2013. — Vol. 97, no. 6. — Pp. 352–357.

292. *Tanamoto T.* Quantum gates by coupled asymmetric quantum dots and controlled-not-gate operation // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 022305.
293. *Bayer M., Hawryliak P., Hinzer K., Fafard S., Korkusinski M., Wasilewski Z. R., Stern O., Forchel A.* Coupling and entangling of quantum states in quantum dot molecules // *Science.* — 2001. — Vol. 291. — Pp. 451–453.
294. *Molotkov S. N., Nazin S. S.* Single-electron spin logical gates // *JETP Lett.* — 1995. — Vol. 62. — Pp. 256–263.
295. *Cummings F. W.* Spontaneous emission from a single two-level atom in the presence of N initially unexcited identical atoms // *Phys. Rev. A.* — 1986. — Vol. 33. — Pp. 1683–1687.
296. *Shchadilova Y. E., Tikhodeev S. G., Paulsson M., Ueba H.* Rotation of a single acetylene molecule on Cu(001) by tunneling electrons in STM // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — Vol. 111. — P. 186102.
297. *Mantsevich V. N., Maslova N. S., Arseyev P. I.* Non-stationary effects in the system of coupled quantum dots influenced by the Coulomb correlations // *JETP.* — 2014. — Vol. 145, no. 1. — Pp. 156–169.