

*Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie  
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej*

*Bartłomiej Szafran*

***Korelacje przestrzenne między  
nośnikami uwięzionymi  
w półprzewodnikowych kropkach  
kwantowych***

*cykl publikacji prezentowany jako rozprawa habilitacyjna*

*Kraków, maj 2006*



*Współautorami moich publikacji po doktoracie byli:  
Janusz Adamowski, Egidijus Anisimovas, Stanisław Bednarek,  
Marcin Ciurla, Tomasz Chwiej, Ismail Essaoudi, Artur Kwaśniowski ,  
Krzysztof Lis, Francois Peeters, Bart Partoens, Tomasz Prus ,  
Przemysław Sep, Bernard Stébé, Tomasz Stopa oraz Maarten Tavernier.  
Dziękuję im wszystkim za współpracę.*

*Dziękuję Januszowi Adamowskiemu i Stanisławowi Bednarkowi za krytyczną  
lekturę streszczenia.*

## Spis treści

1	Wstęp . . . . .	2
1.1	Kropki kwantowe i ich zastosowania . . . . .	2
1.2	Zawartość i układ pracy . . . . .	3
2	Korelacje przestrzenne w układach uwięzionych elektronów . . . . .	4
2.1	Wprowadzenie . . . . .	4
2.2	Efekty korelacyjne w ładowaniu kropek pojedynczymi elektronami . . . . .	7
2.3	Klasyczne cechy korelacji w zakresie ułamkowego efektu Halla. . . . .	9
2.3.1	Molekuły Wignera dla izotropowych kropek parabolicznych w metodzie Hartree-Focka z bazą wielocentrową . . . . .	10
2.3.2	Anizotropowe kropki kwantowe: korespondencja między kwantowymi i klasycznymi molekułami Wignera, dokładne stany własne o złamanej symetrii . . . . .	11
2.3.3	Orientacja molekuł Wignera w kropkach kołowych zaburzonych przez zewnętrzny naładowany defekt . . . . .	13
2.4	Stany kilkuelektronowe dla pary kropek kwantowych sprzężonych bocznie . . . . .	14
2.4.1	Optymalizacja energii wymiany przez asymetrię potencjału uwięzienia . . . . .	15
2.4.2	Układ trzech elektronów w podwójnej kropce: korelacje międzykropkowe, sprzężenie tunelowe i elektrostatyczne . . . . .	16
2.5	Kilkuelektronowe stany koncentrycznych układów kropka - pierścieni i pierścieni - pierścieni . . . . .	17
2.6	Efekty orbitalne pola magnetycznego równoległego do płaszczyzny kropki . . . . .	19
2.7	Porządkowanie ładunku i spinu w kwazijednowymiarowych kropkach kwantowych . . . . .	21
3	Skorelowana lokalizacja elektronów i dziur w podwójnych sprzężonych pionowo kropkach kwantowych . . . . .	22
4	Triony ekscytonowe w pojedynczych i podwójnych kropkach kwantowych . . . . .	25
5	Podsumowanie i wnioski . . . . .	26
6	Literatura . . . . .	29
7	Publikacje autorskie . . . . .	34
7.1	Correlation effects in vertical gated quantum dots [1A] . . . . .	34
7.2	Magnetic-field-induced transformations of Wigner molecule symmetry in quantum dots [2A] . . . . .	39
7.3	Magnetic-field-induced phase transitions of Wigner molecules [3A] . . . . .	43
7.4	Accuracy of the Hartree-Fock method for Wigner molecules at high magnetic fields [4A] . . . . .	60

---

7.5	Anisotropic quantum dots: Correspondence between quantum and classical Wigner molecules, parity symmetry, and broken-symmetry states [5A] . . . .	68
7.6	Exact broken-symmetry states and Hartee-Fock solutions for quantum dots at high magnetic fields [6A] . . . . .	83
7.7	Re-entrant pinning of Wigner molecules in a magnetic field due to a Coulomb impurity [7A] . . . . .	88
7.8	Exchange energy tuned by asymmetry in artificial molecules [8A] . . . . .	95
7.9	Three-electrons in laterally coupled quantum dots: Tunnel vs electrostatic coupling, ground-state symmetry, and interdot correlations [9A] . . . . .	100
7.10	Electron spin and charge switching in a coupled quantum-dot-quantum-ring system [10A] . . . . .	110
7.11	Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings [11A] . . . . .	119
7.12	In-plane magnetic-field-induced Wigner crystallization in a two-electron quantum dot [12A] . . . . .	128
7.13	Spatial ordering of charge and spin in quasi-one-dimensional Wigner molecules [13A] . . . . .	137
7.14	Parity symmetry and energy spectrum of excitons in coupled self-assembled quantum dots [14A] . . . . .	146
7.15	Exciton and negative trion dissociation by an external electric field in vertically coupled quantum dots [15A] . . . . .	156
7.16	Recombination energy for excitonic trions in quantum dots [16A] . . . . .	168
7.17	Excitonic trions in single and double quantum dots [17A] . . . . .	175

## 1 Wstęp

### 1.1 Kropki kwantowe i ich zastosowania

Mianem kropek kwantowych [1] określa się nanostruktury półprzewodnikowe, w których ruch nośników ładunku ograniczony jest w każdym z trzech kierunków do obszaru o rozmiarach rzędu 10–100 nm. Ze względu na dyskretny charakter widma energetycznego układy uwięzione w kropkach nazywane są sztucznymi atomami [2]. Kropka kwantowa z doprowadzonymi kontaktami metalicznymi działa jak tranzystor jednoelektronowy [2], którego charakterystyka prądowo-napięciowa zdominowana jest przez efekt blokady kulombowskiej związanej z dodawaniem do układu kolejnych elektronów. Tranzystor jednoelektronowy wykorzystano do konstrukcji detektora ładunku o czułości pozwalającej na wykrycie nawet ułamka ładunku elementarnego [3]. Kropki kwantowe połączone w układy wielokrotne tworzą tak zwane sztuczne molekuly [4]. Stopień kowalencyjności orbitali elektronowych w sztucznych molekułach zależy od zewnętrznych pól elektrycznego i magnetycznego. Wielokrotne kropki kwantowe mają być zastosowane do konstrukcji spinowej kwantowej bramki logicznej [5]. Pomysł jest w trakcie realizacji, na etapie badań nad własnościami uwięzionego spinu [6, 7, 8]. Pomiaru ładowania kropek w silnych polach magnetycznych wykonywane są dla określenia własności uwięzionych układów elektronowych w warunkach ułamkowego kwantowego efektu Halla [9], to jest niepełnego obsadzenia najniższego poziomu Landaua. Kropki półprzewodnikowe w kształcie pierścienia badane są pod kątem wpływu efektu Aharonova-Bohma na własności uwięzionych układów elektronowych [10]. Badania nad ekscytonami uwięzionymi w kropkach są motywowane zastosowaniami w optoelektronice oraz w komunikacji kwantowej. Laser pracujący na kropkach wymaga mniejszego prądu progowego [11] od tradycyjnego urządzenia opartego na dwuwymiarowych studniach kwantowych [12] dzięki ograniczeniu obszaru aktywnego optycznie, w którym wywoływana jest inwersja obsadzeń, do objętości kropek. Ekscyton w dwuwymiarowej studni kwantowej może każde wzbudzenie termiczne wykorzystać dla zwiększenia swojej energii kinetycznej. Laser na kropkach jest natomiast bardziej stabilny termicznie [11] ze względu na dyskretność widma uwięzionego ekscytonu. Barwę światła laserowego można do pewnego stopnia sterować przez rozmiar kropek wykorzystując kwantowy efekt rozmiarowy [12], który powoduje przesunięcie linii emisyjnej ekscytonu ku fioletowi. Oddziaływanie między ekscytonami związanymi w kropce może zostać wykorzystane do przetwarzania kwantowej informacji [13], a bieksytony w podwójnych kropkach kwantowych stanowią potencjalne źródło fotonów o splątanych stanach polaryzacyjnych [14]. Ponadto, pojedyncza kropka kwantowa może zostać użyta jako źródło pojedynczych fotonów [15] emitowanych na żądanie, potrzebne w komunikacji kwantowej (przydatne na przykład w kryptografii kwantowej dla poufnej dystrybucji klucza prywatnego [16]).

## 1.2 Zawartość i układ pracy

Głównym tematem wybranego cyklu prac [1A-17A] są korelacje przestrzenne nośników uwięzionych w półprzewodnikowych kropkach kwantowych. Korelacje przestrzenne rozumiane są tutaj w duchu chemii kwantowej, jako wpływ oddziaływania między nośnikami na funkcje falowe układu. Badane były warunki, w których następuje silne skorelowanie położenia cząstek, oraz formy i oznaki tego skorelowania. W następnym rozdziale omówione są prace [1A-13A] poświęcone układom zawierającym wyłącznie uwięzione elektrony. Dla tych układów przebadano w szczególności: wywołane zewnętrznym polem magnetycznym efekty orbitalne, transformacje (zmiany) symetrii układu oraz kolektywną – podobną do klasycznej lokalizację ładunku – nazywaną krystalizacją wignerowską. W rozdziałach trzecim i czwartym omówiono prace [14A-17A] poświęcone efektom korelacyjnym w układach, w których oprócz elektronów uwięzione są również dziury. Zbadano przestrzenną korelację nośników w parach elektron - dziura uwięzionych w podwójnych sprzężonych pionowo kropkach kwantowych [14A,15A] oraz dysocjację ekscytonów przez pole elektryczne skierowane w kierunku wzrostu [15A]. Ponadto, zbadano dodatnie i ujemne triony ekscytonowe uwięzione w kropkach pojedynczych [16A,17A] i podwójnych [17A]. W kryształach litym, w studniach i drutach kwantowych, nośniki związane w trionach ekscytonowych są silnie skorelowane. Zbadano, jak zmienia się położenie linii rekombinacji trionów względem linii ekscytonowej w widmie fotoluminescencyjnym, gdy korelacje między cząstkami zostaną stłumione przez silne uwięzienie [16A,17A]. Przedyskutowano [17A] również związek między kolejnością linii w pojedynczej kropce [16A] a rozkładem elektronów i dziur w stanie podstawowym kompleksu w podwójnych kropkach kwantowych.

Oddziaływanie między elektronami uwięzionymi w kropkach kwantowych jest odpowiedzialne za szereg obserwowanych zjawisk: blokadę kulombowską [17], maksymalizację spinu przy obsadzaniu ostatniej otwartej powłoki (reguła Hunda) [18], (niektóre a dla niewielkich liczb elektronów wszystkie) zmiany symetrii stanu podstawowego w zewnętrznym polu magnetycznym [19], oraz ułamkowy okres oscylacji Aharonova-Bohmy w pierścieniach kwantowych [20]. O stopniu skorelowania elektronów decyduje nie tyle bezwzględna wielkość energii oddziaływania, ile jej wartość względem odległości między poziomami jednoelektronowymi. W najmniejszych – samorganizowanych kropkach kwantowych energia oddziaływania (skalująca się z rozmiarem kropki  $R$  jak  $1/R$ ) jest niewielka w porównaniu z energią kinetyczną (skalującą się jak  $1/R^2$ ). W małych kropkach funkcje falowe ulegają niewielkiemu tylko odkształceniu przez oddziaływanie, stopień skorelowania jest niewielki a układ można z powodzeniem opisywać metodami pola średniego, z zaniedbaniem części lub całości efektów kolektywnej lokalizacji. Oznaką silnego uwięzienia i w konsekwencji słabego skorelowania cząstek, jest struktura powłokowa, podobna do atomowej, obserwowana w widmie ładowania kropek samorganizowanych kolejnymi elektronami [21]. W kropkach o uwięzieniu słabym [17, 22, 23] energia oddziaływania dominuje nad kwantyzacją jednoelek-

tronową, struktura powłokowa nie jest obserwowana a efekty korelacyjne mogą być znaczne.

Skorelowanie cząstek nabiera kluczowego znaczenia gdy jednoelektronowy stan podstawowy jest w przybliżeniu zdegenerowany (odległości między jednoelektronowymi poziomami energetycznymi są znacznie mniejsze niż energia oddziaływania). Lokalizacja elektronów nabiera wtedy charakteru kolektywnego. Układy z przybliżoną degeneracją jednoelektronową były przedmiotem badań autora omówionych poniżej. Przybliżona degeneracja występuje w rozległych kropkach kwantowych (gdy kwantowy efekt rozmiarowy staje się zaniedbywalny w porównaniu z energią kulombowską) [1A, 13A, 1B], w silnym polu magnetycznym (gdy poziomy jednoelektronowe dążą do najniższego poziomu Landaua) [2A, 3A, 4A, 5A, 6A, 7A], w wielokrotnych kropkach kwantowych przy słabym sprzężeniu tunelowym (degeneracja ze względu na parzystość) [8A, 9A, 14A, 15A, 17A, 1B] i w pierścieniach kwantowych (przybliżona degeneracja ze względu na moment pędu) [10A, 11A].

Streszczone artykuły autorskie [1A-17A] załączone są na końcu rozprawy i cytowane w tekście z literą 'A' po numerze odnośnika. Pozycje literaturowe z udziałem autora, które nie mieszczą się w temacie rozprawy oraz te, w których wkład autora nie był wiodący, zostały wyróżnione literą 'B' za odnośnikiem. Podsumowanie pracy i wnioski z przeprowadzonych badań podane są w rozdziale piątym.

## 2 Korelacje przestrzenne w układach uwięzionych elektronów

### 2.1 Wprowadzenie

Badania nad skorelowanym zachowaniem uwięzionych elektronów adresowane były dla kropek kwantowych wytwarzanych na bazie heterostruktur GaAs / AlGaAs: dla pionowej kropki sterowanej elektrostatycznie [19] oraz dla układów z dwuwymiarowym gazem elektronowym [22, 23, 24, 25] uwięzionym pod barierą n-AlGaAs przez ładunek zjonizowanych donorów. W strukturach zawierających dwuwymiarowy gaz elektronowy potencjał uwięzienia bocznego kształtowany jest przez napięcia podane na bramki nałożone na powierzchni struktury lub przez jej selektywną oksydację [20, 26]. Kropki tego typu są dosyć rozległe, a efekty korelacji elektronowej znaczące. W badaniach [1A-13A] stosowano przybliżenie masy efektywnej z izotropową masą pasmową elektronu, standardowo używane do opisu stanów elektronowych w kropkach GaAs / AlGaAs [27]. W strukturach GaAs / AlGaAs można z dobrym przybliżeniem zaniedbać skok masy efektywnej i stałej dielektrycznej na złączu. Ponadto, kropki kwantowe GaAs / AlGaAs są wolne od naprężeń dzięki dopasowaniu stałych sieci obydwu półprzewodników. Układ  $N$  uwięzionych elektronów opisywany [1A-13A] był więc za pomocą prostego operatora Hamiltona, o formie takiej jak dla elektronów w próżni

$$H = \sum_{i=1}^N h_i + \sum_{i=1, i>j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + Z(S_z). \quad (1)$$



z hamiltonianem jednoelektronowym  $i$ -tego elektronu

$$h_i = \frac{1}{2m^*} [-i\hbar\nabla_i + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)]^2 + V(\mathbf{r}_i), \quad (2)$$

gdzie  $m^*$  jest pasmową masą efektywną elektronu w GaAs,  $\epsilon$  jest stałą dielektryczną tego półprzewodnika,  $V$  oznacza potencjał uwięzienia,  $\mathbf{A}$  jest potencjałem wektorowym pola magnetycznego. W równaniu (1)  $Z(S_z)$  oznacza energię zeemanowskiego oddziaływania spinów elektronów z zewnętrznym polem magnetycznym [ $Z(S_z) = -g^*\mu_B B S_z/\hbar$ , gdzie  $g^* = -0.44$  jest efektywnym czynnikiem Landego,  $\mu_B$  magnetonem Bohra, a  $S_z$  –  $z$ -ową składową spinu całkowitego]. W silnych polach magnetycznych, przy nie zapełnionym najniższym poziomie Landaua (współczynnik zapełnienia poziomu Landaua  $\nu < 1$ ), oddziaływanie Zeemana prowadzi do polaryzacji spinowej układu, nie ma jednak konsekwencji orbitalnych.

Przestrzenne funkcje falowe elektronów uwięzionych w kropkach są bardzo podatne na modyfikacje przez zewnętrzne pole magnetyczne. W uzyskiwanych laboratoryjnie polach magnetycznych orbita Landaua [o promieniu  $(2\hbar/eB)^{1/2} = (36.3/\text{nm})/(B)^{1/2}$  – pole  $B$  wyrażone w teslach] może całkowicie zmieścić się wewnątrz kropki, nigdy jednak nie staje się porównywalna z rozmiarami atomowymi, stąd znacznie silniejsze efekty orbitalne pola dla sztucznych atomów niż dla atomów naturalnych. Pole magnetyczne powoduje kompresję gęstości ładunku wokół centrum potencjału uwięzienia i w konsekwencji wzrost energii oddziaływania. Wzrost energii oddziaływania wywołuje transformacje symetrii stanu podstawowego: układ osiąga niższy stopień lokalizacji i mniejszą energię oddziaływania przechodząc do stanu o wyższym momencie pędu. Transformacje momentu pędu w kropkach kołowych o parabolicznym potencjale uwięzienia zostały gruntownie przebadane i poświęcona jest im bogata literatura [27, 28]. W pracach autorskich zbadane zostały natomiast transformacje stanu podstawowego dla kropek o niższych symetriach [5A, 7A, 12A], dla kropek podwójnych [8A, 9A] oraz w kropkach kołowych o silnie nieparabolicznym potencjale uwięzienia – w koncentrycznych układach kropka-pierścień [10A] i pierścień-pierścień [11A].

W silnych polach magnetycznych, w których występuje ułamkowy efekt Halla ( $\nu < 1$ ), stopień skorelowania elektronów uwięzionych w kropce ulega gwałtownemu zwiększeniu. Im wyższe jest pole (niższy współczynnik zapełnienia) tym rozkład elektronów bardziej przypomina rozkład klasycznych ładunków punktowych w konfiguracji o najniższej energii potencjalnej. Ten zbliżony do klasycznego rozkład elektronów określany jest w literaturze mianem molekuly Wignera [27, 28, 29, 30, 31], a jego tworzenie nazywane jest krystalizacją wignerowską. Krystalizacja wignerowska w kropkach kołowych zachodzi tylko w funkcji względnych położenia elektron-elektron i nie jest widoczna w gęstości ładunku, która zachowuje symetrię obrotową. W pracach autorskich badana była możliwość obserwacji krystalizacji wignerowskiej gęstości ładunku [4A, 5A, 6A, 7A, 12A, 13A], która niekiedy wymaga złamania symetrii potencjału zewnętrznego. Wskazano, że krystalizacja wignerowska w układzie

laboratoryjnym, jak również występowanie lub nieobecność transformacji symetrii stanu podstawowego, są uzależnione od symetrii klasycznej molekuly Wignera [5A].

W granicy nieskończonego pola magnetycznego jednoelektronowe wyspy skrytalizowanego wignerowsko ładunku dążą do ładunków punktowych [2A, 3A, 5A, 6A, 7A]. W kropkach podwójnych efekt ten prowadzi do zniesienia sprzężenia tunelowego między kropkami. Wraz ze wzrostem sprzężenia tunelowego znika kowalencyjny charakter orbitali jednoelektronowych [32, 33, 34, 8A, 9A] zastąpiony przez lokalizację typu jonowego. W pracy [8A] zademonstrowano możliwość optymalizacji energii wymiany (wartości ważnej dla zastosowań spintronicznych [32]) przez asymetrię potencjału kropek. W pracy następnej [9A] przedstawiono pierwsze dokładne studium problemu trójelektronowego, na którego przykładzie przedyskutowano ewolucję korelacji międzykropkowych w funkcji 'siły' sprzężenia tunelowego.

W pierścieniach kwantowych [10] transformacje momentu pędu występują również przy zaniedbaniu oddziaływania elektron-elektron. Źródłem transformacji w pierścieniach kwantowych jest efekt Aharonova-Bohma [35], a więc nie tyle samo pole magnetyczne, co jego potencjał wektorowy. W pracach autorskich zbadane zostały układy sprzężone koncentrycznie kropka-pierścień [10A] oraz pierścień-pierścień [11A]. Układy te stanowią szczególny rodzaj sztucznych molekuł, w których sprzężenie tunelowe między wnękami potencjału zachodzi przy zachowaniu symetrii obrotowej. Zbadano zmianę lokalizacji stanu podstawowego [10A, 11A] i wpływ redystrybucji ładunku między częściami składowymi układu na okres oscylacji Aharonova-Bohma.

Efekty orbitalne pola magnetycznego zależą od orientacji jego wektora. Najsilniejszy jest wpływ pola magnetycznego przyłożonego prostopadle do płaszczyzny uwięzienia kropki (ta orientacja rozważana była w pracach [1A-11A]). Pola zorientowanego równolegle do płaszczyzny używa się natomiast wtedy, gdy efekty orbitalne są niepożądane. Efekty orbitalne pola w płaszczyźnie, choć słabsze, zerowe jednak nie są. W pracy [12A] przedstawiono pierwsze studium efektów orbitalnych pola magnetycznego zorientowanego w płaszczyźnie dwuelektronowej kropki kwantowej i wywołanej tym polem krystalizacji wignerowskiej.

Praca [13A] opisuje krystalizację wignerowską oraz skorelowanie spinów elektronowych w długich, kwazijednowymiarowych kropkach kwantowych. Zgodnie z twierdzeniem Lieba i Mattisa [36] jednowymiarowe układy elektronowe bez pola magnetycznego posiadają niskospinowy stan podstawowy, co umożliwia – lecz nie implikuje – przestrzennego uporządkowania spinu. Pokazano [13A], że istnieje ścisły związek między występowaniem dalekozasięgowego antyferromagnetycznego porządku spinowego a krystalizacją wignerowską ładunku.

Zdecydowaną większość obliczeń dla układów elektronowych wykonano metodą oddziaływania konfiguracji, która umożliwia dokładne rozwiązanie kilkuelektronowego równania Schrödingera. W metodzie tej używa się bazy wyznaczników Slatera skonstruowanych z funkcji własnych hamiltonianu jednoelektronowego (2). W większości prac użyto przybliże-

nia ściśle dwuwymiarowego. Przybliżenie to jest usprawiedliwiane płaską geometrią kropek i silnym uwięzieniem elektronów w kierunku wzrostu (pionowym), przy którym oddziaływanie nie zmienia kształtu jednoelektronowych funkcji falowych opisujących lokalizację w kierunku pionowym. Po model trójwymiarowy sięgano, gdy było to niezbędne: 1) w pracy [1A] zawierającej ilościowe porównanie wyników obliczeń z eksperymentem, 2) w pracy [12A] poświęconej efektom orbitalnym pola magnetycznego skierowanego w płaszczyźnie uwięzienia, 3) w pracy [13A] na temat kwazjednowymiarowych kropek kwantowych (ze względu na niecałkowalną osobliwość potencjału kulombowskiego w jednym wymiarze).

## 2.2 Efekty korelacyjne w ładowaniu kropek pojedynczymi elektronami

W chemii kwantowej punktem odniesienia dla dyskusji stopnia i konsekwencji przestrzennego skorelowania elektronów w dokładnej funkcji falowej jest tak zwana ograniczona metoda HF [37]. W tej wersji metody HF wieloelektronową funkcję falową przyjmuje się w postaci odpowiednio zantysymetryzowanego (wyznacznik Slatera) iloczynu funkcji numerowanych jednoelektronowymi liczbami kwantowymi. W rezultacie zakłada się, że nie tylko funkcja falowa całego układu, lecz również funkcje jednoelektronowe posiadają symetrię potencjału zewnętrznego. W jaki sposób ograniczona metoda HF zaniedbuje korelacje łatwo zrozumieć na przykładzie dwóch elektronów w długiej ściśle jednowymiarowej studni kwantowej. W rozwiązaniu dokładnym elektrony będą starać się przebywać na przeciwległych końcach studni tak aby ich oddziaływanie było jak najmniejsze. W granicy dużego rozmiaru kropki prawdopodobieństwo znalezienia elektronów po przeciwnych stronach środka studni będzie wynosić 100%. Natomiast w ograniczonej metodzie HF każda z gęstości jednoelektronowych jest symetryczna względem środka studni: elektrony przebywają z prawdopodobieństwem 50% po tej samej stronie środka studni, tak jak przy zaniedbanym oddziaływaniu.

Zaniedbanie korelacji w metodzie HF jest konsekwencją przybliżenia pojedynczej konfiguracji elektronowej, czyli konkretnego obsadzenia stanów jednoelektronowych. W rzeczywistości określone są tylko całkowite a nie jednoelektronowe liczby kwantowe. Metoda oddziaływania konfiguracji, której wyniki omówione są poniżej, polega na użyciu wielu konfiguracji jednoelektronowych składających się na określoną symetrię całkowitą jako bazy dla problemu wieloelektronowego. Baza konfiguracyjna jest zupełna. Rozwiązanie dowolnie zbliżone do dokładnego uzyskujemy z bazą zawierającą odpowiednio dużą liczbę starannie wybranych konfiguracji.

Korelacje elektron–elektron często mają decydujący wpływ na własności układów, nie są jednak bezpośrednio mierzalne. Celem pracy [1A] było oszacowanie znaczenia efektów korelacyjnych dla wielkości uzyskanych doświadczalnie przy badaniu pionowej kropki kwantowej sterowanej elektrostatycznie [19]. Obliczenia [1A] wykorzystywały opracowany wcześniej [2B]

model urządzenia, w którym problem potencjału elektrostatycznego w kropce kwantowej i problem własny dla elektronów uwięzionych w kropce rozwiązywane były zgodnie z samouzgodnionym schematem Poissona-Schrödingera. Potencjały chemiczne układu uwięzionych elektronów, które decydują o ładowaniu kropki kolejnymi elektronami, zostały obliczone ograniczoną metodą HF oraz metodą oddziaływania konfiguracji. Efekty korelacyjne zostały następnie wyznaczone [1A] przez porównanie wyników obydwu metod dla diagramu stabilności urządzenia [19] i dla zależności od pola elektrycznego napięcia bramki, przy którym w kropce wiązane są kolejne elektrony.

Potencjał uwięzienia w kropce pionowej [19] zbliżony jest do parabolicznego [2B]. Problem własny pojedynczego elektronu w dwuwymiarowym kołowo symetrycznym potencjale parabolicznym, z polem magnetycznym skierowanym prostopadle do płaszczyzny uwięzienia, posiada rozwiązanie analityczne (tzw. stany Focka-Darwina) [27]. Pod nieobecność pola magnetycznego elektrony obsadzają kolejne poziomy energetyczne zgodnie z regułą Hunda [2B]. Pole magnetyczne wywołuje transformacje symetrii spinowej i orbitalnej stanu podstawowego. W silnym polu magnetycznym najniższe poziomy o niedodatnich momentach pędu (najniższe pasmo Focka-Darwina) degenerują się i wyrównują z najniższym poziomem Landaua. Stan podstawowy utworzony po obsadzeniu przez elektrony najniższego pasma Focka-Darwina, tzw. kropla maksymalnej gęstości [38], jest całkowicie spinowo - spolaryzowana i odpowiada współczynnikowi zapełnienia  $\nu = 1$  [27].

W pracy [1A] zbadano transformacje stanu podstawowego w funkcji pola magnetycznego dla układów  $N = 2, 3$  i  $4$  elektronów aż do osiągnięcia przez układ stanu kropli maksymalnej gęstości. Wszystkie zbadane transformacje [1A] są wynikiem oddziaływania elektron-elektron (przy zaniedbanym oddziaływaniu transformacje pojawiają się dopiero dla  $5$  i więcej elektronów). Obliczono w funkcji pola magnetycznego widmo potencjałów chemicznych, przy których następuje ładowanie kropki kolejnymi elektronami z poziomu Fermiego elektrod dla słabego ( $\hbar\omega = 2$  meV), umiarkowanego ( $\hbar\omega = 6$  meV) i silnego uwięzienia ( $\hbar\omega = 10$  meV). Okazuje się, że dokładność metody HF zależy od stanu spinowego układu i jest największa dla stanów o całkowitej polaryzacji spinowej [1A], w których zgodnie z zakazem Pauliego (wpisanym do wyznacznikowej funkcji falowej HF), prawdopodobieństwo znalezienia dwóch elektronów w tym samym punkcie jest zerowe, co do pewnego stopnia uwzględnia kolektywne zachowanie elektronów. Ponadto, przeszacowanie dokładnej energii przez metodę HF jest tym większe im słabsze jest uwięzienie [1A]. W rozwiązaniu dokładnym sekwencja symetrii stanów podstawowych jest taka sama dla wszystkich rozważonych [1A] energii uwięzienia  $\hbar\omega$ . Dla słabego uwięzienia sekwencja symetrii przewidziana przez HF jest przekłamana: nie występują w niej stany niskospinowe [1A]. Przy umiarkowanym uwięzieniu sekwencja symetrii HF jest poprawna, lecz wyraźnie przeszacowane są zakresy stabilności stanów podstawowych o większym spinie kosztem sąsiednich stanów z sekwencji symetrii. Dla silnego uwięzienia efekty korelacyjne są niewielkie i HF odtwarza poprawne ilościowo widmo potencjałów

chemicznych w funkcji pola. Linie ładowania kropki w funkcji napięcia bramki i pola magnetycznego obliczone metodą oddziaływania konfiguracji są wyraźnie bliższe doświadczalnym niż te otrzymane w podejściu HF [1A]. Okazuje się jednak [1A], że efekty korelacyjne dla diagramu stabilności (diamentów kulombowskich na płaszczyźnie potencjałów przykładanych do elektrod) są niewielkie. Korelacyjne przeszacowanie energii przez HF w dużej części znosi się w obliczeniach potencjału chemicznego. Znoszenie błędów korelacyjnych nie występuje (nawet częściowo) dla dwóch elektronów. W rezultacie, linia odpowiadająca wiązaniu dwóch elektronów na diagramie stabilności policzona metodą HF wykazuje największe odstępstwo od wyników dokładnych [1A].

### 2.3 Klasyczne cechy korelacji elektron–elektron w zakresie ułamkowego efektu Halla

Kropla maksymalnej gęstości ( $\nu = 1$ ), jest końcowym, wysokopolowym stanem podstawowym spinowo spolaryzowanych, nie oddziaływujących elektronów. Przy dalszym zwiększaniu pola magnetycznego oddziaływanie pomiędzy elektronami prowadzi jednak do dalszych transformacji, zgodnie z mechanizmem kompresji gęstości ładunku przez pole magnetyczne i dekompresji przez przejście stanu podstawowego do stanu o wyższym momencie pędu. Pierwsze tego typu przejście powoduje rozpad kropli maksymalnej gęstości i pojawienie się minimum gęstości ładunku w centrum kropki [27]. Po rozpadzie kropli najniższy poziom Landaua przestaje być całkowicie zapełniony ( $\nu$  spada poniżej jedynki), a stopień skorelowania elektronów gwałtownie rośnie. Elektrony zaczynają się skuteczniej unikać, co powoduje utworzenie podobnego do klasycznego rozkładu elektronów widocznego na diagramach funkcji korelacji par [27, 28, 3B]. Moment pędu przy całkowitej spinowej polaryzacji elektronów dla  $\nu < 1$  przyjmuje tzw. magiczne wartości [27, 28] (dla  $N < 6$  elektronów moment pędu wzrasta o  $N$  przy każdej transformacji), dla których elektrony zajmują względem siebie położenia zbliżone do klasycznych punktów równowagi stabilnej.

W polach magnetycznych powyżej rozpadu kropli maksymalnej gęstości układy elektronowe stanowią zlokalizowany odpowiednik stanów odpowiedzialnych za ułamkowy efekt Halla w dwuwymiarowym gazie elektronowym [4B]. Faktycznie, problem badany przez Laughlina [39] – diagonalizacja kołowo symetrycznego hamiltonianu w bazie funkcji z najniższego poziomu Landaua – nie różni się zbytnio od problemów badanych dla kropek kwantowych. Wzrost korelacji między elektronami dla  $\nu < 1$  związany jest z pojawieniem się dodatkowych zer wieloelektronowej funkcji falowej (poza tymi, które wynikają z zakazu Pauliego) i ich klasteryzacji wokół położenia elektronów. Efekt lokalizacji dodatkowych zer wokół położenia elektronów otrzymuje się również w kropkach kwantowych przy  $\nu < 1$  [4B].

Głównym przedmiotem badań autora nad kropkami kwantowymi w zakresie ułamkowego efektu Halla [2A, 3A, 4A, 5A, 6A, 7A] był klasyczny charakter korelacji elektron–elektron.

Pierwsze prace wykorzystywały nieograniczone podejście HF [2A, 3A, 4A], które daje klasyczne rozwiązania w granicy nieskończonego pola. Energia HF okazała się dokładna w granicy  $B \rightarrow \infty$  [4A] mimo, że rozwiązania równań HF wykazują krystalizację wignerowską widoczną w gęstości ładunku [2A, 3A] (nie tylko w funkcji korelacji par [27, 28]), która z konieczności łamie kołową symetrię potencjału zewnętrznego. Wynik ten stanowił motywację do opracowania nowej wersji metody oddziaływania konfiguracji [5A] i do poszukiwań skryzalizowanej gęstości ładunku w dokładnym rozwiązaniu równania Schrödingera. Krystalizacja obserwowana w laboratoryjnym układzie odniesienia [5A, 7A] mogłaby zostać zweryfikowana przez bezpośredni pomiar gęstości elektronowej techniką sondy skanningowej [40], która wykorzystując sprzężenie pojemnościowe (kulombowskie) między dwuwymiarowym gazem elektronowym a elektronami na metalowym ostrzu sondy, pozwala na zobrazowanie rozkładu gęstości ładunku w nanostrukturze półprzewodnikowej.

### 2.3.1 Molekuły Wignera dla izotropowych kropek parabolicznych w metodzie Hartree-Focka z bazą wielocentrową

W rozwiązaniu dokładnym dla potencjału o symetrii kołowej podobne do klasycznego uporządkowanie przestrzenne elektronów powstaje w wewnętrznych stopniach swobody układu (względnych współrzędnych elektron–elektron) przy zachowaniu symetrii obrotowej gęstości ładunku [27, 28]. W funkcji falowej Hartree-Focka wewnętrzne stopnie swobody układu elektronowego nie są jednak opisane dokładnie. Efekt energetyczny rozdzielania ładunku jest jednak na tyle duży, że nieograniczona metoda HF produkuje rozwiązania z krystalizacją wignerowską w laboratoryjnym układzie odniesienia kosztem złamania symetrii kołowej potencjału zewnętrznego [29, 41, 42, 2A, 3A]. W gęstości ładunku obliczonego nieograniczoną metodą HF po rozpadzie kołowo symetrycznej kropli maksymalnej gęstości powstają wyspowa maksima, każde związane z ładunkiem pojedynczego elektronu.

Pierwsze rozwiązanie równań HF z fazą molekularną przy  $\nu < 1$  zostało uzyskane przez Müllera i Koonina [41] w bazie Focka-Darwina [27] (iloczynów Gaussianu scentrowanego w początku układu współrzędnych, wielomianu Laguerra i funkcji własnej  $z$ -owej składowej momentu pędu). Rozsunięte przez oddziaływanie wyspy ładunku jednoelektronowego w granicy silnego pola lokalizują się do punktów. Baza Focka-Darwina funkcji scentrowanych w początku układu współrzędnych słabo opisuje ten typ lokalizacji, w związku z czym rachunki w silnych polach stają się wolno zbieżne z rozmiarem bazy. Pomysł na rachunki przeprowadzone w pracach autorskich [2A, 3A] polegał na zastosowaniu bazy wielocentrowej, to jest bazy zbudowanej z funkcji

$$\Psi_{(X_n, Y_n)}(x, y) = \exp\{-\alpha/4 [(x - X_n)^2 + (y - Y_n)^2] + i\beta/2(x - X_n)(y + Y_n)/2\hbar\}/2\sqrt{\pi\alpha} \quad (3)$$

o gaussowskim kształcie gęstości ładunku, zlokalizowanych wokół różnych punktów  $\{\mathbf{R}_n = (X_n, Y_n)\}$  na płaszczyźnie uwięzienia. Funkcja (3) dla  $\alpha = \beta = eB/\hbar$  jest funkcją najniższego poziomu Landaua [przy cechowaniu Landauowskim  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (-By, 0, 0)$ ]. Położenia punktów  $\{\mathbf{R}_n\}$  zostały potraktowane [2A, 3A] jako parametry wariacyjne. Baza wielocentrywa umożliwia rachunki dla silnego pola przy minimalnym rozmiarze – jednej funkcji bazowej na elektron. Podobnej bazy użyto wcześniej w pracy [43] do opisu własności dynamicznych dwuwymiarowego kryształu Wignera bez zewnętrznego potencjału uwięzienia.

Badania [1A,2A] wykazały, że molekuly Wignera mogą występować w różnych konfiguracjach przestrzennych (izomerach). Tuż po rozpadzie kropki maksymalnej gęstości różne konfiguracje są niemal zdegenerowane energetycznie, lecz niższe energie odpowiadają izomerom, w których elektrony zajmują położenia na obrzeżu kropki. W miarę wzrostu pola elektrony przechodzą do wewnętrznych pierścieni molekuly [2A, 3A] tak, by ostatecznie zająć położenia odpowiadające najniższej energii klasycznego układu ładunków punktowych [44]. Do granicy klasycznej dążą również energia potencjalna, odległości elektron–elektron itd. Transformacje kształtu molekuł uzyskane w metodzie HF są zgodne z trendem występującym w rozwiązaniach dokładnych uzyskanych metodą mieszania konfiguracji przez innych autorów [27, 45, 46]. W półklasycznym modelu molekuł Wignera wykazano następnie [5B], że transformacje kształtu są wynikiem modyfikacji efektywnego oddziaływania Hartree przez zewnętrzne pole magnetyczne, które decyduje o stopniu lokalizacji gęstości jednoelektronowych.

W granicy  $B \rightarrow \infty$  błąd HF staje się liniową funkcją  $1/B$  (rys. 8 pracy [4A]). Wyniki HF dążą więc do dokładnej wartości własnej energii w granicy nieskończonego pola magnetycznego [4A]. Praca [3A] pokazała wcześniej, że energię potencjalną HF w silnym polu można zidentyfikować z energią układu klasycznego. Zgodnie z [4A] podobny wniosek obowiązuje więc również dla dokładnej energii potencjalnej. Liniową zbieżność energii HF w funkcji  $1/B$  do energii dokładnej opublikowali później Yannouleas i Landman [47].

### 2.3.2 Anizotropowe kropki kwantowe: korespondencja między kwantowymi i klasycznymi molekułami Wignera, dokładne stany własne o złamanej symetrii

Przeszacowanie wariacyjne energii w metodzie HF maleje z polem magnetycznym [4A] i znika w granicy  $B \rightarrow \infty$ , w której rozkład gęstości ładunku można zidentyfikować z klasycznym. Za przeszacowanie energii po części odpowiedzialne jest złamanie przez HF symetrii potencjału zewnętrznego. Drugim czynnikiem odpowiedzialnym za przeszacowanie energii jest zaniedbanie przez HF korelacji między elektronami z różnych wysp ładunku. HF w wersji nieograniczonej potrafi opisać sprzężenie między całymi wyspami ładunku, lecz zaniedbuje reakcję funkcji falowej na zmianę położenia elektronów w ramach każdej z rozdzielonych wysp

[6A]. Aby odpowiedzieć na pytanie, czy klasyczny rozkład ładunku może zostać zaobserwowany w skończonym polu magnetycznym należy pozbyć się błędu korelacyjnego. Dla wyeliminowania błędu korelacyjnego autor opracował nową wersję metody mieszania konfiguracji [5A], w której bazę wyznaczników Slatera konstruowano z funkcji własnych hamiltonianu jednoelektronowego zdiagonalizowanego w wielocentrowej bazie funkcji (3) [5A]. Zmiana sposobu użycia bazy wielocentrowej - z przybliżenia jednoelektronowych funkcji HF [2A, 3A, 4A] - do konstrukcji bazy konfiguracyjnej dla dokładnej diagonalizacji równania Schrödingera [5A], dała całkiem interesujące narzędzie rachunkowe. Okazało się mianowicie, że za pomocą superpozycji funkcji (3) można ze świetną dokładnością [5A] opisać stany Focka-Darwina [z zależnościami kątowymi w formie  $\exp(im\phi)$ ], w tym również te odpowiadające wyższym poziomom Landaua. Metoda z bazą wielocentrową (dalej nazywana *wielocentrową metodą mieszania konfiguracji*) może być z równym powodzeniem stosowana do potencjałów o dowolnej, niższej niż kołowa symetrii. Elastyczność bazy wynika ze swobody wyboru centrów, który można optymalizować dla konkretnego problemu.

Wielocentrową metodę mieszania konfiguracji wykorzystano do zbadania układów  $N = 2, 3$  i  $4$  elektronów w eliptycznym, kwadratowym i trójkątnym potencjale uwięzienia [5A]. Układ klasycznych ładunków punktowych w takich potencjałach posiada niekiedy kilka równoważnych konfiguracji najniższej energii obróconych względem siebie o pewien kąt. Mówimy wtedy o występowaniu *klasycznej degeneracji układu* [5A]. Badania [5A] wykazały, że własności układu kwantowego w silnym polu magnetycznym są w dużym stopniu uzależnione od występowania lub nieobecności klasycznej degeneracji. Pod nieobecność klasycznej degeneracji (gdy konfiguracja klasyczna oddaje pełną symetrię potencjału uwięzienia) gęstość ładunku układu kwantowego dąży do granicy klasycznej w sposób gładki, bez transformacji symetrii stanu podstawowego, a krystalizacja wignerowska zachodzi w laboratoryjnym układzie odniesienia. Jeżeli natomiast, klasyczna degeneracja zachodzi, gęstość ładunku przypomina superpozycję wszystkich zdegenerowanych konfiguracji klasycznych. Superpozycja ta zawsze odtwarza symetrię potencjału zewnętrznego. Co więcej, w warunkach klasycznej degeneracji ze wzrostem pola magnetycznego obserwuje się transformacje symetrii stanu podstawowego. Przy transformacjach w sposób nieciągły zmieniają się własności układu (rozmiar, wartość energii oddziaływania, moment magnetyczny itd.).

Pokazano następnie [5A], że przy klasycznej degeneracji, molekula Wignera może pojawiać się w laboratoryjnym układzie odniesienia dla pól wywołujących transformacje symetrii. Degenerację występującą przy transformacjach wykorzystano [5A] do konstrukcji stanów o złamanej symetrii dokonanej poprzez superpozycję funkcji falowych przecinających się poziomów energetycznych [5A]. Przez odpowiedni dobór fazy superpozycja dwóch stanów odtwarza wszystkie równoważne konfiguracje klasycznej molekuly Wignera. Dla pól, w których zachodzą transformacje symetrii, tak skonstruowane stany są dokładnymi stanami własnymi hamiltonianu mimo, że odpowiednia gęstość ładunku posiada niższą symetrię niż



potencjał zewnętrzny.

Powyższe wnioski obowiązują również dla kropek z izotropowym potencjałem uwięzienia [5A]. Podobne do klasycznych rozkłady ładunków można skonstruować przez superpozycje stanów o sąsiednich magicznych momentach pędu. Fakt ten tłumaczy wcześniejszą obserwację lokalnych minimów przeszacowania energii HF [4A] występujących dla pól indukujących transformacje momentu pędu. Transformacje te rozłożone są równomiernie na skali pola magnetycznego. W skali  $1/B$  transformacje (a więc i możliwe do zrealizowania dokładne stany własne o złamanej symetrii) pojawiają się coraz częściej w miarę jak  $B$  rośnie. Błąd HF znika do zera w nieskończonym polu [4A], gdy rozmiary wysp ładunku jednoelektronowego w stanach o złamanej symetrii kurczą się do punktów. Dzieje się tak dlatego, że zaniebdany przez HF efekt korelacji między położeniami elektronów z różnych wysp ładunku jednoelektronowego traci znaczenie w silnym polu, gdy wyspy te kurczą się do punktów [6A]. Porównanie dokładnych stanów własnych o złamanej symetrii i rozwiązań HF zostało szczegółowo omówione w pracy [6A]. Pokazano [6A], że metoda HF stara się skompensować zaniebdanie efektu korelacyjnego przez zwiększenie lokalizacji wysp ładunku jednoelektronowego, które w efekcie okazują się bardziej rozdzielone niż w rachunku dokładnym. Efekt przesadzonej lokalizacji wysp jednoelektronowych jest największy dla układu dwóch elektronów i z liczbą elektronów maleje [6A].

### 2.3.3 Orientacja molekuł Wignera w kropkach kołowych zaburzonych przez zewnętrzny naładowany defekt

W potencjale o symetrii kołowej gęstość ładunku niezdegenerowanego stanu podstawowego o określonym momencie pędu zawsze posiada symetrię obrotową i nie wykazuje żadnej orientacji w laboratoryjnym układzie odniesienia. Orientacja gęstości ładunku w kropce kołowej może jednak zostać ustalona przez zaburzenie symetrii potencjału uwięzienia. W realnych kropkach zaburzenie idealnej symetrii potencjału zewnętrznego jest nieuniknione. Źródłem zaburzenia może być nierówność powierzchni, nieidealna geometria elektrod, obecność naładowanych domieszek, itp. Wielocentrowa metoda mieszania konfiguracji została wykorzystana [7A] dla zbadania wpływu zewnętrznego naładowanego defektu (zjonizowanego donora lub akceptora) położonego poza osią kropki, w pewnej odległości od płaszczyzny uwięzienia, na uwięziony układ elektronowy. Potencjał dodatniej domieszki symuluje również efekt potencjału ładunku wyindukowanego na powierzchni elektrody przez ładunek uwięziony w kropce [6B]. Przy słabym zaburzeniu przecięcia poziomów energetycznych dla kolejnych magicznych momentów pędu przechodzą w wąskie odpychanie poziomów (*anticrossing*). W obszarze odpychania poziomów funkcja falowa jest mieszaniną stanów o kolejnych magicznych momentach pędu. Klasyczne rozkłady gęstości, pracowicie konstruowane w poprzedniej pracy [5A], pojawiają się więc spontanicznie stabilizowane przez zaburzenie symetrii potencjału.

W zakresie anticrossingu molekula Wignera zostaje wyprowadzona z wewnętrznych stopni swobody układu i pojawia się w laboratoryjnym układzie odniesienia. Gdy się to stanie, orientacja molekuly zazwyczaj pokrywa się wówczas z klasyczną, choć zdarzają się wyjątki, np. dla dodatniego defektu w polach stosunkowo niskich [7A]. Poza zakresem anticrossingu orientacja molekuly zanika, gęstość ładunku przypomina pierścień i poszczególne elektrony przestają być widoczne. Pojawianie się skryształizowanej gęstości ładunku ma więc charakter powtarzający się z polem magnetycznym (*reentrant pinning*). Innymi słowy, stany elektronowe w kropkach kołowych w zakresie ułamkowego efektu Halla reagują na słabe zaburzenie jak kryształ elektronowy ulegając *pinningowi* tylko w polach, w których zachodzą transformacje symetrii. Poza nimi układ elektronowy reaguje jak ciecz ulegając pod wpływem słabego zaburzenia niewielkiemu przemieszczeniu jako całość, bez projekcji silnego skorelowania elektronów do układu laboratoryjnego.

Silne zaburzenie pochodzące od bliżej położonej ujemnie naładowanej domieszki trwale ustala orientację molekuly Wignera [7A]. Zakresy pól magnetycznych odpowiadających sąsiednim anticrossingom przekrywają się, a ich szerokość na skali energii staje się tak wielka, że samo oddziaływanie poziomów przestaje być widoczne. Wtedy ewolucja gęstości ładunku do granicy klasycznej molekuly Wignera zaczyna zachodzić w sposób gładki. Przy dodatnim ładunku domieszki podobny efekt obserwuje się tylko dla dwóch elektronów. Dla trzech i czterech elektronów pod dodatnio naładowanym defektem wiąże się jeden elektron, który ekranuje efekt zaburzenia tak, że ustalanie orientacji zachowuje powracający charakter nawet dla niewielkich odległości domieszki od płaszczyzny kropki [7A].

## 2.4 Stany kilkuelektronowe dla pary kropek kwantowych sprzężonych bocznie

Pary kropek kwantowych tworzą sztuczne układy molekularne [27]. Orbitale elektronowe w podwójnych kropkach mogą mieć charakter jonowy (z lokalizacją w jednej kropce) lub kowalencyjny (uwspólniony dla obydwu kropek) zależnie od 'siły' sprzężenia tunelowego, którą można regulować za pomocą napięć zmieniających szerokość bariery (dla kropek z elektrostatycznym potencjałem uwięzienia) [24], lub pola magnetycznego przyłożonego prostopadle do kierunku sprzężenia kropek [32, 33, 34]. Rozdział ten streszcza badania autora nad układami dwóch i trzech elektronów w kropkach sprzężonych bocznie, z polem magnetycznym skierowanym prostopadle do wspólnej płaszczyzny uwięzienia. Obliczenia zostały wykonane wielocentrową metodą oddziaływania konfiguracji opracowaną wcześniej dla kropek o niskiej symetrii [5A], która świetnie nadaje się również do badań nad sztucznymi molekułami w omawianej konfiguracji.

### 2.4.1 Optymalizacja energii wymiany przez asymetrię potencjału uwięzienia

Spiny elektronów uwięzionych w wielokrotnych kropkach kwantowych mają być wykorzystane do konstrukcji kwantowej bramki logicznej [5]. Sprzężenie między spinami, niezbędne do funkcjonowania bramki, zachodzić ma w orbitalnych stopniach swobody [32]. Różnice w symetriach przestrzennych dwuelektronowej funkcji singletowej i trypletowej przy niezerowym sprzężeniu tunelowym dają rozszczepienie energetyczne, nazywane energią wymiany [32]. Prowadzone są prace nad stworzeniem bramki logicznej pracującej na parze sprzężonych bocznie kropek elektrostatycznych [24] produkowanych w oparciu o poddany działaniu potencjału bramki (*gated*) dwuwymiarowy gaz elektronowy. Kropki te [24] są jednak stosunkowo rozległe. Dlatego, z powodu dominującego oddziaływania kulombowskiego między elektronami, można się spodziewać całkowitej separacji jednoelektronowych funkcji falowych (i w konsekwencji degeneracji poziomów trypletowych i singletowych) nawet przy całkowicie usuniętej barierze tunelowej. Energia wymiany może okazać się więc zbyt mała dla kontroli kolektywnych stanów spinowych. Możliwe i proste w zastosowaniu antidotum zasugerowane zostało w pracy [8A]. Autor wykonał pierwsze dokładne rachunki dla asymetrycznych sprzężonych bocznie kropek kwantowych i wskazał [8A], że energia wymiany może zostać kilkakrotnie zwiększona przez wprowadzenie asymetrii do potencjału uwięzienia. W warunkach eksperymentalnych kropki zazwyczaj są asymetryczne. Symetryczne sprzężenie następuje tylko dla dokładnie dobranych napięć leżących na diagonalu łączącym punkty potrójne na diagramie stabilności układu (*honeycomb stability diagram*) [24]. Pomimo tego, rachunki dokładne dla energii wymiany wykonywane były tylko dla kropek o idealnej symetrii [33, 34]. W pracy [32] przeliczono wprawdzie efekt pola elektrycznego wymuszającego asymetrię między kropkami, lecz tylko dla funkcji falowej Heitlera-Londona, w której zaniedbane jest podwójne obsadzenie kropek. Zaniedbany efekt, jak się okazuje [8A], ma kluczowe znaczenie dla wpływu asymetrii na energię wymiany.

W rachunkach [8A] zastosowano model potencjału uwięzienia w postaci dwóch studni gaussowskich [14A, 15A, 17A, 7B] o różnych głębokościach. Wybór potencjału gaussowskiego był podyktowany symulacjami numerycznych [8B], zgodnie z którymi uwięzienie w kropkach elektrostatycznych jest najsilniejsze, gdy profil potencjału jest gaussowski (im silniejsze uwięzienie tym łatwiej silnie sprzęgnąć kropki). Rachunki [8A] przeprowadzono z bazą siedmiu centrów na kropkę, która dla dużej odległości między kropkami zawiera stany o momencie pędu aż do  $l = \pm 5$  [5A].

Wyniki obliczeń można podsumować następująco 1) Dla  $B = 0$  energia wymiany oraz prawdopodobieństwo obsadzenia przez parę elektronów tej samej kropki są minimalne gdy potencjał jest symetryczny. Przy asymetrii potencjału obydwa elektrony starają się zająć głębszą z kropek. Elektronom w stanie trypletowym starania te utrudnia zakaz Pauliego. W konsekwencji asymetria faworyzuje stan singletowy, co pozwala zwiększyć energię wymiany nawet kilkakrotnie. 2) W silnym polu magnetycznym elektrony chętniej zajmują

głębszą z kropek, jeśli ich spiny są równoległe. Ten zaskakujący efekt związany jest ze zmianą kolejności poziomów singletowego i trypletowego dla podwójnego obsadzenia, będącym odpowiednikiem polaryzacji spinowej dla kropki pojedynczej. 3) Prawdopodobieństwo podwójnego obsadzenia w silnym polu magnetycznym nabiera cech klasycznych: staje się schodkową (binarną) funkcją różnicy głębokości obydwu kropek.

#### 2.4.2 Układ trzech elektronów w podwójnej kropce: korelacje międzykropkowe, sprzężenie tunelowe i elektrostatyczne

Ewolucja układu dwóch elektronów w funkcji pola magnetycznego kończy się degeneracją energii stanu singletowego i trypletowego, która pojawia się wraz ze stłumieniem tunelowania funkcji falowych między kropkami [32, 33, 34, 8A]. Dla układów o trzech i większej liczbie elektronów interesująca fizyka rozgrywa się również po zniesieniu tunelowania przez pole magnetyczne. W literaturze znaleźć można wiele prac nad układami z większą od dwóch liczbą elektronów w sprzężonych kropkach kwantowych (patrz prace cytowane w [9A]), lecz wyłącznie w przybliżeniu pola średniego. Autor wykonał [9A] natomiast pierwsze studium układu trzech elektronów w symetrycznym potencjale kropki podwójnej metodą oddziaływania konfiguracji. W symetrycznej kropce dobrą liczbą kwantową jest parzystość względem odbicia przez środek symetrii potencjału. W każdym ze stanów własnych operatora parzystości gęstość ładunku dzieli się między kropki równo po półtora ładunku elementarnego. Z tego powodu każda próba umieszczenia ładunku dwóch elektronów w jednej lub drugiej kropce da stan niestacjonarny, chyba że tunelowanie między kropkami jest całkowicie zaniedbywalne. Fakt ten związany jest z klasyczną degeneracją układu [5A] opisaną dokładnie w rozdziale 2.3.2. Stan podstawowy układu poddany jest transformacjom parzystości i spinu w funkcji pola magnetycznego. Obserwowana [9A] w stanie podstawowym sekwencja symetrii parzystości i spinu (poza drobnymi wyjątkami [9A]) jest taka jak dla kropki kołowej. Pokazano [9A], że zniesienie tunelowania przez pole magnetyczne powoduje degenerację stanów niskoenergetycznej części widma względem parzystości. Po zniesieniu efektu tunelowego układ można podzielić na parę elektronów umieszczonych w jednej kropce i pojedynczy elektron w kropce drugiej. Układ dwóch elektronów uwięzionych w tej samej kropce w rosnącym polu magnetycznym podlega oscylacjom singlet-tryplet, przy czym ewolucja tego podukładu ulega zaburzeniu przez potencjał kulombowski trzeciego (samotnego) elektronu [7A], który ustala orientację dwuelektronowej molekuly Wignera. Międzykropkowe korelacje elektron–elektron zostały zbadane przy użyciu stanów własnych o złamanej parzystości skonstruowanych podobnie jak w [5A] z superpozycji zdegenerowanych stanów podstawowych. Wyniki badań pokazują [9A], że korelacje międzykropkowe są wciąż obecne po stłumieniu sprzężenia tunelowego. Przy braku tunelowania korelacje międzykropkowe mają jednoznacznie nielokalny charakter i nie można ich opisać w teorii lokalnych funkcjonałów gęstości

[48]. Przy większej szerokości bariery międzykropkowe korelacje elektron–elektron znikają, choć sprzężenie elektrostatyczne między gęstościami ładunku elektronowego jest wciąż bardzo wyraźne [9A].

## 2.5 Kilkuelektronowe stany koncentrycznych układów kropka - pierścien i pierścien - pierścien

Opór elektryczny półprzewodnikowych układów o kształcie pierścienia oscyluje periodycznie w funkcji strumienia pola magnetycznego przenikającego przez pierścien [20, 26, 49, 50, 51]. Za oscylacje odpowiedzialny jest efekt Aharonova – Bohma [35], czyli modyfikacja fazy funkcji falowej elektronu przez potencjał wektorowy pola magnetycznego ( $\mathbf{A}$ ), która zachodzi nawet wtedy, gdy elektron porusza się w obszarze w którym pole magnetyczne ( $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ) znika. W pomiarach własności nanostruktur półprzewodnikowych używa się jednorodnego pola magnetycznego. Z tego powodu, w przeciwieństwie do problemu oryginalnie rozważanego przez Aharonova i Bohma [35], elektrony poruszają się więc w obszarze, w którym pole magnetyczne nie jest zerowe. Autor przedstawił pierwszy zależny od czasu opis wpływu siły Lorentza na oscylacje Aharonova – Bohma w otwartych półprzewodnikowych pierścieniach kwantowych [9B, 10B]. Rozdział ten opowiada jednak o badaniach nad zamkniętymi pierścieniami kwantowymi. Efekt Aharonova-Bohma dla pierścieni zamkniętych ma nieco inny charakter: potencjał wektorowy zewnętrznego pola magnetycznego powoduje transformacje momentu pędu pojedynczego elektronu w zamkniętym pierścieniu kwantowym [10]. Moment pędu elektronu w stanie podstawowym rośnie o 1 przy zwiększeniu strumienia pola magnetycznego o każdy kolejny kwant  $\Phi_0 = h/e$ . Dla ściśle jednowymiarowego pierścienia energia stanu podstawowego i całe widmo energetyczne oscyluje idealnie periodycznie z okresem  $\Phi_0$  [10]. W układach kilku ( $N$ ) elektronów oddziaływanie kulombowskie prowadzi do pojawienia się oscylacji o okresie ułamkowym:  $\Phi_0/N$  [20, 54, 55]. Zamknięte pierścienie kwantowe wytwarza się w technologii epitaksjalnej wykorzystującej niedopasowanie stałej sieci InAs/GaAs [52]. Produkowane są również układy GaAs/AlAs zawierające podwójne, współśrodkowe pierścienie kwantowe [53]. Pierścienie o dowolnie złożonych kształtach wytwarzane są przez oksydacje powierzchni heterostruktur GaAs/n-AlAs z dwuwymiarowym gazem elektronowym. Do tych ostatnich pierścieni można doprowadzić kontakty i mierzyć prąd przepływający przez układ, podobnie jak w elektrostatycznych kropkach kwantowych [20, 26]. Do samozorganizowanych pierścieni kwantowych [52, 53] jak dotąd nie udało się podpiąć kontaktów. Pomiar własności układów elektronowych wykonuje się więc metodą spektroskopii pojemnościowej [52] osadzając pierścienie w planarnej heterostrukturze, w której ładunek zgromadzony w warstwie pierścieni zmienia się przez zewnętrzne pole elektryczne.

Przedmiotem badań autora były sztuczne molekuly w konfiguracji pierścien-kropka [10A]

oraz pierścieni - pierścien [11A], sprzężone tunelowo przy zachowaniu kołowej symetrii potencjału uwięzienia. Celem prac [10A, 11A] było zbadanie wpływu efektu Aharonova-Bohma na stany sztucznej molekuly. Kilkuelektronowy problem własny został rozwiązany metodą oddziaływania konfiguracji, w której radialne jednoelektronowe funkcje falowe uzyskuje się na siatce różnicowej. Za pomocą tej metody można badać układy dwuwymiarowe o symetrii kołowej i dowolnym radialnym profilu potencjału z uwzględnieniem obecności prostopadłego pola magnetycznego.

Badania dla stanu podstawowego układu uwięzionego w strukturze kropka-pierścien [10A] wykazały, że pole magnetyczne może zmieniać rozkład elektronów między obydwoma wnękami potencjału. W szczególności pokazano [10A], że w koncentrycznych układach hybrydowych małe, centralnie położone kropki z głębszym niż pierścien potencjałem uwięzienia wiążą elektrony dopiero w polach magnetycznych na tyle silnych, że promień Landaua staje się porównywalny z rozmiarem kropki. W ten sposób udało się zasymulować silnopolowy efekt wiązania elektronów w lokalnych minimach potencjału, które zachodzi w rozległych kropkach elektrostatycznych [22, 23]. Przy równej głębokości pierścienia i kropki, w granicy silnego pola, elektrony pod wpływem wzajemnego odpychania przechodzą do położonego na zewnątrz pierścienia. Jest to związane z zauważoną wcześniej tendencją układów elektronowych do zajmowania konfiguracji klasycznych w silnym polu magnetycznym [2A, 3A, 5A]. W oscylacjach Aharonova-Bohma uczestniczą tylko elektrony uwięzione w pierścieniu. Redystrybucja ładunku między kropką a pierścieniem wywołuje więc gwałtowną zmianę ułamkowego okresu oscylacji Aharonova-Bohma [10A].

Interesująca jest zależność od pola magnetycznego rozszczepienia singlet-tryplet (energii wymiany) w układzie dwóch elektronów, z których jeden uwięziony jest w kropce, a drugi w pierścieniu. Efekt Aharonova-Bohma dla elektronu uwięzionego w pierścieniu zwiększa jego moment pędu wraz ze wzrostem pola magnetycznego, podczas, gdy moment pędu elektronu w kropce pozostaje równy zero [10A]. Między oscylacjami energia wymiany zmienia się liniowo z polem magnetycznym. W silnym polu funkcja falowa elektronu związanego z pierścieniem i rozprzeczona do wysokiego momentu pędu, zostaje całkowicie usunięta z kropki, zajętej przez drugi elektron. W konsekwencji całka przekrywania znika prowadząc do degeneracji singlet-tryplet.

O ile przejścia elektronów między kropką a pierścieniem zachodzą w funkcji pola magnetycznego w sposób gwałtowny, w układzie pierścien-pierścien [11A] redystrybucja ładunku ma bardziej ciągły charakter. Dla pierścieni o podobnym potencjale uwięzienia i równej głębokości orbitale jednoelektronowe o niskich momentach pędu w niskim polu magnetycznym mają charakter kowalencyjny i zajmują w równym stopniu obydwie pierścienie [11A]. Sprzężenie tunelowe między pierścieniami znika jednak dla wyższych pól magnetycznych, w których w nisko-energetycznej części widma jednoelektronowego pojawiają się stany o wysokim momencie pędu. Za zniesienie sprzężenia tunelowego odpowiedzialny jest potencjał

odśrodkowy [11A] podnoszący energie stanów zlokalizowanych w pierścieniu wewnętrznym. W rezultacie, dla silnego pola w widmie jednoelektronowym pojawiają się dwie odseparowane gałęzie poziomów energetycznych dla obydwu pierścieni, każda z własnym okresem Aharonova-Bohma. Dla pojedynczego elektronu w układzie pierścieni o tej samej głębokości niższa energetycznie okazuje się gałąź związana z pierścieniem wewnętrznym, o większym okresie oscylacji na skali pola magnetycznego (moment pędu stanów związanych z pierścieniem wewnętrznym rośnie wolniej z polem). Przebadane układy dwu- i trójelektronowe w silnym polu lokalizują się natomiast w pierścieniu zewnętrznym (jak cząstki klasyczne [2A, 3A, 5A]) aby zminimalizować energię oddziaływania.

Krystalizacja wignerowska w podwójnych pierścieniach następuje w dwóch etapach [11A]. W pierwszym etapie, w miarę wzrostu pola gęstość elektronowa opuszcza pierścień wewnętrzny. W etapie drugim, dla wyższych pól magnetycznych, wzmocnieniu ulegają korelacje kątowe tak, że na diagramach funkcji korelacji par widoczna jest coraz silniejsza lokalizacja elektronów wokół klasycznych położań równowagi stabilnej.

Okazało się [11A], że rozkład ładunku determinuje zależność potencjałów chemicznych od pola magnetycznego. Potencjały chemiczne w funkcji pola układają się w bardzo regularne wzory z załamaniami o kształcie litery V lub  $\Lambda$ , charakterystyczne dla liczby elektronów uwięzionych w każdym z pierścieni. Wzory załamań ulegają modyfikacjom pod wpływem redystrybucji ładunku między pierścieniami wraz ze zmianą okresu oscylacji Aharonova-Bohma. Ponadto, zrywaniu sprzężenia tunelowego przez pole magnetyczne towarzyszy wyraźnie silniejsza zależność potencjałów od pola. Wskazano w ten sposób [11A] możliwość eksperymentalnego wyznaczenia rozkładu ładunku między pierścieniami oraz jego modyfikacji przez pole magnetyczne.

## 2.6 Efekty orbitalne pola magnetycznego równoległego do płaszczyzny kropki

Efekty orbitalne pola magnetycznego zależą od jego orientacji i rosną wraz ze strumieniem pola przez obszar, w którym uwięzione są elektrony. Przestrzenne funkcje falowe elektronów są najbardziej podatne na wpływ pola zorientowanego prostopadle do powierzchni uwięzienia (patrz wyżej). Orientacji równoległej do płaszczyzny uwięzienia używa się natomiast w celu wyeliminowania efektów orbitalnych - na przykład dla badania spinowych rozszczepień zeemanowskich [56, 57, 58]. Spinowa bramka logiczna [5, 32] na podwójnej kropce kwantowej wymaga silnego zewnętrznego pola magnetycznego dla wyraźnego rozszczepienia zeemanowskiego jednoelektronowych poziomów spinowych, umożliwiające wykonywanie operacji na pojedynczym spinie. Silne pole tłumi jednak sprzężenie tunelowe między kropkami [32, 33, 34, 8A], które jest z kolei niezbędne dla realizacji operacji na parze spinów. W pracach doświadczalnych [24, 25, 58] pomiary wykonuje się więc w polu magnetycznym (około

10 tesli) zorientowanym w płaszczyźnie uwięzienia tak, aby rozszczepienie Zeemana było duże, a tłumienie tunelowania jak najslabsze.

Istniejące kropki kwantowe, nawet te oparte na strukturach z dwuwymiarowym gazem elektronowym [24, 25, 58], mają skończony rozmiar w kierunku wzrostu, nie są ściśle płaskie i efekty orbitalne pola magnetycznego zorientowanego równoległe do płaszczyzny kropki nie są dokładnie zerowe. Uzyskano dokładne (choć numeryczne) rozwiązanie problemu własnego dla dwóch elektronów w potencjale uwięzienia oscylatora harmonicznego [12A] o symetrii obrotowej wokół osi  $z$  (równe energie uwięzienia w  $x$  i  $y$ :  $\hbar\omega_x = \hbar\omega_y = \hbar\omega$ , silniejsze uwięzienie w kierunku  $z$ :  $\hbar\omega_z \geq \hbar\omega$ ) z polem magnetycznym przyłożonym równoległe do osi  $x$ . Przyjęty model potencjału oscylatora harmonicznego umożliwił separację ruchu środka masy i redukcję złożoności problemu z sześciu do trzech zmiennych. Po redukcji problem własny można rozwiązać numerycznie z dowolną dokładnością. Podano [12A] analityczne rozwiązanie równania własnego dla stanu podstawowego przy zaniedbanym oddziaływaniu. Otrzymana funkcja falowa, podobna do (3), lecz z eliptycznym rozkładem gęstości wokół osi  $x$ , została następnie [12A] wykorzystana do konstrukcji wariacyjnej funkcji próbnej dla problemu własnego ruchu względnego dwóch oddziaływujących elektronów.

Z punktu widzenia poprzednich badań [4A, 5A, 7A] interesujące jest łamanie symetrii obrotowej układu względem osi  $z$  przez pole magnetyczne zorientowane w kierunku  $x$  (momentu pędu względem osi  $z$  w polu  $B$  przestaje być określony). Dla kropek o kształcie zbliżonym do sferycznego ( $\omega \simeq \omega_z$ ), pole magnetyczne wywołuje transformacje symetrii parzystości. Transformacje parzystości stanu podstawowego w funkcji pola zachodzą wraz ze zmianami stanu spinowego między singletem a trypletem [12A]. Oscylacjom singlet-tryplet w kropce sferycznej odpowiadają transformacje momentu pędu (względem osi  $x$ ) i krystalizacja wignerowska w wewnętrznych stopniach swobody układu. Dla kropek płaskich ( $\hbar\omega_z \gg \hbar\omega$ ) pole magnetyczne prowadzi ostatecznie [12A] do krystalizacji wignerowskiej gęstości ładunku w formie wysp jednoelektronowych rozciągniętych wzdłuż kierunku pola magnetycznego [12A]. W wyniku rozdzielenia funkcji jednoelektronowych w silnym polu pojawia się degeneracja energii orbitalnych singletu i trypletu. Układ zachowuje się więc podobnie jak para elektronów w kropce podwójnej [8A]. W kropkach płaskich z polem  $B$  w płaszczyźnie uwięzienia rolę bariery tunelowej separującej ładunki odgrywa potencjał oddziaływania kulombowskiego między elektronami.

Dla płaskich kropek energia rozszczepienia singlet-tryplet jest w zakresie małych  $B$  niezależna od pola, lecz w granicy dużych  $B$  znika [12A]. Wskazano istnienie przedziału pola magnetycznego, przy którym rozszczepienie singlet-tryplet silnie zależy od pola poprzez efekty orbitalne. Zależność ta w pomiarach może maskować spinowy efekt Zeemana.

Uzyskane rozwiązanie dla dwóch elektronów z polem w płaszczyźnie [12A] autor następnie wykorzystał do opracowania i przetestowania metody oddziaływania konfiguracji włączonej do modelu [59] kropki kwantowej z TU Delft [25].



## 2.7 Porządkowanie ładunku i spinu w kwazjednowymiarowych kropkach kwantowych

W poprzednich rozdziałach pracy omawiana była krystalizacja wignerowska zachodząca w silnych polach magnetycznych. W rozległych kropkach kwantowych, w których dominuje oddziaływanie kulombowskie, krystalizacja wignerowska zachodzi również bez pola magnetycznego. Zbadano ewolucję gęstości ładunku w długich, prawie jednowymiarowych kropkach [13A] powstałych z odcinka drutu kwantowego [60, 61]. W jednowymiarowych kropkach kwantowych, ze względu na nieobecność klasycznej degeneracji [5A], krystalizacji wignerowskiej podlega gęstość ładunku. Zgodnie z twierdzeniem Lieba i Mattisa [36] układy jednowymiarowe oddziałujące kulombowsko posiadają zawsze stan podstawowy o minimalnej wartości spinu (0 lub  $\hbar/2$  dla odpowiednio parzystych i nieparzystych  $N$ ). Niskospinowy stan podstawowy może, lecz nie musi być związany z antyferromagnetycznym porządkiem przestrzennym. Badania [13A] wykazały, że dalekozasięgowe antyferromagnetyczne porządkowanie przestrzenne spinów istotnie zachodzi, ale tylko wtedy, gdy ładunek zostaje uporządkowany w formie molekuly Wignera [13A].

Wykonano rachunki mieszania konfiguracji dla układów kilku ( $N < 6$ ) elektronów w kwazjednowymiarowej kropce kwantowej [13A]. Kropka kwazjednowymiarowa posiada potencjał uwięzienia, który w jednym kierunku ('podłużnym') jest znacznie słabszy niż w pozostałych dwóch ('poprzecznych'). Elektrony zajmują najniższy stan kwantyzacji poprzecznej (oddziaływanie nie zmienia kształtu silnie uwięzionych poprzecznych funkcji falowych [11B, 12B]). Całkowanie oddziaływania kulombowskiego z poprzecznymi gęstościami ładunku daje efektywny jednowymiarowy potencjał uwięzienia [11B]. Rachunki oddziaływania konfiguracji w kierunku podłużnym wykorzystywały metodę różnic skończonych [13A].

W miarę wzrostu długości kropki oddziaływanie kulombowskie staje się duże w porównaniu z energią kinetyczną kwantyzacji przestrzennej. W długich kropkach gęstość ładunku stara się wtedy zminimalizować oddziaływanie przyjmując formę molekuly Wignera z  $N$  maksimumami ładunku jednoelektronowego. Krystalizacja wignerowska (przejście fazowe ciecz elektronowa - kryształ elektronowy) zachodzi tutaj w sposób ciągły w funkcji długości kropki. Stan podstawowy w granicy dużej długości kropki staje się  $2^N$  krotnie zdegenerowany ze względu na parzystość i spin. W każdym ze zdegenerowanych stanów podstawowych gęstość ładunku ma tę samą molekularną formę. W stanach wzbudzonych natomiast gęstość ładunku przyjmuje kształt nieoptymalny ze względu na oddziaływanie: posiada więcej niż  $N$  maksimumów (jednoelektronowe wyspy ładunku więc nie powstają). Ponadto okazuje się, że spinowo spolaryzowany stan podstawowy ze skryształizowaną wignerowsko gęstością ładunku, posiada określoną parzystość, która ściśle zależy od liczby elektronów (parzystość spolaryzowanego stanu podstawowego jest dana przez parzystość liczby  $M$ , gdzie liczba elektronów  $N = 2M + 1$  lub  $N = 2M$ ). Stan o przeciwnej parzystości posiada więcej niż  $N$  maksimumów

ładunku. W pracy [13A] podano ścisły dowód tej własności.

Porządkowanie przestrzenne spinów zostało zbadane [13A] przy wykorzystaniu spinowej funkcji korelacji par. W kropkach stosunkowo małych, w których krystalizacja wignerowska nie zachodzi, spinowy porządek ma charakter krótkozasięgowy i związany jest z zakazem Pauliego. Porządek dalekiego zasięgu pojawia się dopiero dla dużych kropek, w których ładunek porządkuje się w molekułę Wignera. W przeciwieństwie do ładunku, spin nie porządkuje się w układzie laboratoryjnym, lecz tylko w wewnętrznych stopniach swobody [13A] (podobnie jak ładunek w kropkach kołowych - patrz rozdział 2.3). Dalekozasięgowe uporządkowanie spinowe ma więc tylko względny, korelacyjny charakter.

Wcześniej przeprowadzone rachunki pola średniego (LDA) [62] przewidywały (dla parzystych  $N$ ), że dla małych kropek korelacje spinowe są całkowicie nieobecne (gęstość spinu 'do góry' pokrywa się dokładnie z gęstością spinów 'w dół'), i że przy pewnej, dużej, krytycznej wartości długości kropki następuje gwałtowna krystalizacja wignerowska ładunku z pojawieniem się antyferromagnetycznej gęstości spinowej. Antyferromagnetyczna fala spinowa otrzymana w metodzie LDA pojawia się w laboratoryjnym układzie odniesienia w jednej z dwóch równoważnych konfiguracji, z których jedna jest odbiciem zwierciadlanym drugiej [62]. Każda z nich łamie jednak symetrię potencjału uwięzienia. Wyniki dokładne [13A] wskazują, że przyczyną pojawienia się artefaktu łamania symetrii w obliczeniach pola średniego dla rzadkiego gazu elektronowego jest wzrost zasięgu przestrzennych korelacji spinowych w warunkach krystalizacji wignerowskiej. Złamanie symetrii pozwala metodom pola średniego na uwzględnienie efektów, które w rozwiązaniu dokładnym zachodzą tylko w wewnętrznych stopniach swobody. Zgodnie z tą regułą metoda HF dla kropek kołowych produkuje molekułę Wignera w gęstości ładunku, a LDA dla kropek jednowymiarowych daje antyferromagnetyczną gęstość spinową w układzie laboratoryjnym zamiast w spinowej funkcji korelacji par.

Metodę oddziaływania konfiguracji stworzoną do kropek kwazjednowymiarowych [13A] rozszerzono następnie tak, aby uwzględniała obsadzenie wzbudzonych podpasz kwantyzacji poprzecznej. Uogólniona metoda dostarczyła wyników odniesienia dla studium łamania parzystości jednoelektronowej metody LDA zastosowanej do podwójnych kropek sprzężonych pionowo [13B].

### 3 Skorelowana lokalizacja elektronów i dziur w podwójnych sprzężonych pionowo kropkach kwantowych

Pierwsza praca autorska [14A] na temat ekscytonów w podwójnych sprzężonych pionowo kropkach kwantowych została zainspirowana eksperymentalną detekcją efektu sprzężenia tunelowego między kropkami InAs/GaAs widocznego w wyraźnym przesunięciu ku czerwieni linii fotoluminescencyjnych wraz z malejącą szerokością bariery tunelowej [63].

Dla opisu ekscytonów w podwójnych kropkach kwantowych [14A] przyjęto prosty model potencjału uwięzienia w postaci dwóch trójwymiarowych studni gaussowskich. W pojedynczej samozorganizowanej kropce kwantowej korelacje elektron-dziura nie są wielkie ponieważ uwięzienie jest bardzo silne (patrz podrozdział 2.2). Sytuacja ulega zmianie dla kropek podwójnych. Przy słabym sprzężeniu tunelowym (małym rozszczepieniu stanów parzystych i nieparzystych elektronu i dziury w porównaniu z oddziaływaniem elektron-dziura) należy oczekiwać silnego skorelowania rozkładu nośników między kropkami. Dla opisu pary elektron-dziura zastosowano [14A] metodę wariacyjną z funkcją próbną, w której główny nacisk położono na opis kolektywnego zachowania elektronu i dziury w kierunku wzrostu. Rachunki były ograniczone do stanów z zerowym wypadkowym momentem pędu niesionym przez funkcje obwiedni elektronu i dziury. Tylko takie stany bowiem mogą być aktywne optycznie.

Zgodnie z uzyskanymi wynikami [14A] w granicy dużej szerokości bariery stany pary elektron-dziura można podzielić na dwie grupy: w grupie pierwszej elektron i dziura przebywają w tej samej kropce, natomiast w grupie drugiej dziura i elektron są rozdzielone przestrzennie i przebywają w różnych kropkach. Sygnał luminescencji pochodzi tylko z pierwszej grupy tzw. stanów jasnych. W miarę jak szerokość bariery tunelowej maleje, energia stanów z grupy drugiej (tzw. stanów ciemnych) również maleje ponieważ rozdzielone różnoimienne ładunki zbliżają się do siebie. Energie stanów z grupy jasnej zaczynają się zmieniać z szerokością bariery dopiero gdy występuje odpowiednio silne sprzężenie tunelowe między kropkami [14A]. Nośnikiem sprzężenia tunelowego jest przede wszystkim elektron [14A]. Dziura ze względu na swoją wielokrotnie większą masę efektywną tuneluje znacznie słabiej. Gdy sprzężenie tunelowe staje się znaczne, wprowadzony powyżej podział na dwie grupy stanów ulega zatarciu. Prawdopodobieństwo znalezienia elektronu i dziury w tej samej kropce staje się niezerowe dla grupy stanów 'ciemnych' (pojawia się więc możliwość rekombinacji ze stanów 'ciemnych', stąd wprowadzony cudzysłów). Podobnie niezerowe staje się prawdopodobieństwo znalezienia elektronu i dziury w różnych kropkach dla grupy 'jasnej'. W konsekwencji siła oscylatora dla rekombinacji ekscytonu ze stanów 'ciemnych' rośnie, a stanów 'jasnych' maleje z malejącą szerokością bariery. W granicy silnego sprzężenia, gdy rozszczepienie energetyczne stanów jednocząstkowych staje się większe od energii oddziaływania kulombowskiego, stany pary stają się przybliżonymi stanami własnymi parzystości jednocząstkowych, a rozkład nośników przypomina przypadek braku oddziaływania – w każdym ze stanów prawdopodobieństwo znalezienia dziury i elektronu w tej samej kropce jest bliskie 50 %. Ponadto, gdy pojawia się sprzężenie tunelowe, linie rekombinacji pochodzące ze stanów 'ciemnych' ulegają gwałtownemu przesunięciu ku fioletowi w przeciwieństwie do stanów 'jasnych', które przesuwane są ku czerwieni [14A]. Takie zachowanie wynika ze sposobu, w jaki stany jednocząstkowe składają się na stany pary nośników: w stanach 'jasnych' obydwie cząstki elektron i dziura są w jednocząstkowych stanach parzystych, a w stanach 'ciem-

nych' obydwie cząstki są w stanach nieparzystych (rekombinacja pary elektron-dziura jest zabroniona w stanach, których całkowita parzystość jest ujemna).

Widmo fotoluminescencyjne kropek podwójnych jest bardzo podatne na modyfikacje przez pole elektryczne przyłożone wzdłuż kierunku sprzężenia, które dąży do dysocjacji stanów jasnych i segregacji ładunków elektronów i dziur w różnych kropkach. Efekt Starka dla pary elektron-dziura w podwójnych kropkach został zbadany w pracy [15A]. Zamiast modelu gaussowskiego przyjęto podwójną prostokątną studnię potencjału dla opisanego uwięzienia w kierunku wzrostu oraz potencjał oscylatora harmonicznego w płaszczyźnie prostopadłej [15A]. Przyjęty model pozwala na dokładne rozwiązanie problemu własnego dla pary elektron-dziura na efektywnie trójwymiarowej siatce różnicowej po odseparowaniu poprzecznego ruchu środka masy. W ramach modelu udaje się w sposób ścisły opisać efekt oddziaływania elektron-dziura i korelacje między nośnikami.

Najważniejszym wynikiem pracy [15A] jest wniosek, że w podwójnych kropkach kwantowych efekt Starka wywołuje dysocjację ekscytonu na drodze charakterystycznego odpychania (anticrossingu) stanu jasnego i ciemnego w widmie luminescencyjnym podwójnej kropki kwantowej. Dokładnie taki charakter efektu został wykryty w pomiarach przeprowadzonych przez grupę niemiecką [64]. Obliczenia [15A] wyprzedziły tu doświadczenie [64]. Niemiecka praca eksperymentalna [64] została wysłana do czasopisma około trzy miesiące po zgłoszeniu pracy autorskiej [15A] do Physical Review. Następnie dysocjacja ekscytonu na drodze anticrossingu stanu jasnego z ciemnym, zgodnie z opisanym mechanizmem [15A], została również potwierdzona doświadczalnie przez grupę amerykańską [65].

Spektakularny sukces bardzo prostego modelu polegający na prawidłowym przewidzeniu jakościowego charakteru efektu Starka w podwójnej kropce kwantowej i mechanizmu dysocjacji ekscytonu wymaga pewnego komentarza. Efekt Starka dla ekscytonu w kropkach pojedynczych [66] pozwala na dokładne określenie szczegółów potencjału uwięzienia samorganizowanych kropek kwantowych, które ze względu na dużą czułość struktur na warunki wzrostu, są inne dla każdej z grup wytwarzających kropki. Mechanizm dysocjacji ekscytonu przez anticrossing ciemnej i jasnej linii luminescencyjnej wykryty przez dwa niezależne ośrodki [64, 65] świadczy o uniwersalnym charakterze zjawiska. Efekt Starka w kropkach podwójnych jest wielokrotnie silniejszy niż w kropkach pojedynczych [65]. Dzieje się tak dlatego, że indukowany elektryczny moment dipolowy związany z drobnymi przesunięciami ładunku elektronów i dziur w ramach jednej kropki jest znacznie mniejszy od momentu dipolowego wyindukowanego wskutek rozdzielania elektronu i dziury do różnych kropek. Dlatego efekt Starka w kropkach podwójnych jest w dużym stopniu niezależny od szczegółów potencjału uwięzienia każdej z kropek. Dla głównego tematu rozprawy ważny jest również fakt, że w kropkach podwójnych decydujące znaczenie dla zachowania w polu elektrycznym ma oddziaływanie elektron-dziura, które pole elektryczne musi pokonać dla rozdzielania ładunków. Bez oddziaływania elektron-dziura anitcrossing poziomów jasnego z

ciemnym nie zachodzi. Co więcej, pod nieobecność pola elektrycznego to właśnie oddziaływanie prowadzi do pojawienia się stanów ciemnych, z których rekombinacja jest zabroniona nie przez reguły wyboru (złą symetrię) lecz przez rozdzielanie nośników między kropkami [14A] (bez oddziaływania prawdopodobieństwo znalezienia elektronu i dziury w tej samej kropce jest zawsze równe 50%). W kropkach pojedynczych natomiast, wpływ oddziaływania na efekt Starka jest niewielki. Drobne przesunięcia elektronu i dziury w ramach jednej kropki energii oddziaływania nie zmieniają w sposób znaczący.

## 4 Triony ekscytonowe w pojedynczych i podwójnych kropkach kwantowych

Ekscyton ( $X$ ) będący obiektem ładunkowo neutralnym może przegrupować ładunki elektronu i dziury tak, żeby związać dodatkową dziurę (powstaje wtedy dodatnio naładowany trion oznaczany  $X^+$  lub  $X_2^+$ ) lub dodatkowy elektron (tworząc trion ujemny  $X^-$ ) [67]. Nośniki większościowe w kompleksach trójcząstkowych są silnie skorelowane. Tylko funkcje próbne uwzględniające to skorelowanie pozwalają opisać samo wiązanie i stabilność układu. W kryształach litych dodatkowe nośniki wiążą się na neutralnym ekscytonie bardzo słabo, co utrudnia eksperymentalną detekcję trionów, skutecznie destabilizowanych przez wzbudzenia termiczne w niskich nawet temperaturach. Własności trionów ekscytonowych stały się dostępne dla eksperymentu dzięki nanotechnologii. Energia wiązania trionów jest wielokrotnie zwiększona w układach ściśle dwuwymiarowych [68]. Zwiększenie energii wiązania przez uwięzienie umożliwiło jednoznaczny identyfikację linii rekombinacji trionów w dwuwymiarowych studniach kwantowych [69].

Rekombinacja dziury i elektronu związanych w trionie daje linię luminescencyjną o energii  $h\nu_T = E(T) - E_n$ , gdzie  $T = X^+$  lub  $X^-$ , a  $E_n$  jest energią nośnika, który zostaje po rekombinacji, to jest elektronu (dla  $X^-$ ) lub dziury (dla  $X^+$ ). W kryształach litych, dwuwymiarowych studniach i drutach kwantowych przesunięcie (ku czerwieni) linii trionu względem linii ekscytonu ( $h\nu_X$ ) w widmie luminescencyjnym  $\Delta E_T = h\nu_X - h\nu_T$  jest równe energii wiązania trionu względem dysocjacji na ekscyton i wolny nośnik. W kryształach litych [70] oraz w środowisku ściśle dwuwymiarowym [68] trion dodatni  $X^+$  jest silniej związany niż  $X^-$  ze względu na większą masę dziury. Ponadto, we wszystkich układach, w których ruch nośników jest swobodny w jednym chociaż kierunku, to jest w kryształach litych [70], studniach dwuwymiarowych [69] i w drutach kwantowych [71, 12B] linie rekombinacji trionów są zawsze przesunięte ku czerwieni względem linii ekscytonu. Przesunięcie ku fioletowi oznaczałoby ujemną energią wiązania, to jest niestabilność trionu.

Położenie linii trionowych w widmie luminescencyjnym pojedynczej sferycznej kropki kwantowej zostało zbadane w pracy autorskiej [16A]. Rachunki wariacyjne pokazały, że już w granicy słabego uwięzienia (dużych kropek) następuje zmiana kolejności linii trionu

ujemnego i dodatniego: linia  $X^-$  odpowiada mniejszej energii od  $X^+$  [16A]. W granicy silnego uwięzienia linia  $X^-$  wędruje głęboko poniżej (ku czerwieni) linii  $X$ , natomiast  $X^+$  przesuwa się powyżej (ku fioletowi) linii  $X$  [16A]. Przesunięcie linii  $X^+$  powyżej  $X^-$ , a następnie powyżej  $X$ , jest wynikiem modyfikacji oddziaływań kulombowskich przez uwięzienie w kropce [16A]. Dziury, jako cięższe, lokalizują się w skończonych potencjałach silniej od elektronów. Dlatego w granicy silnego uwięzienia destabilizujące  $X^+$  oddziaływanie dziura-dziura jest silniejsze od stabilizującego kompleks oddziaływania elektron-dziura. Odwrotna sytuacja zachodzi dla  $X^-$ , stąd przeciwne przesunięcie linii  $X^-$  w widmie (ku czerwieni a nie ku fioletowi). Przesunięcie linii  $X^+$  ku fioletowi względem  $X$  jest możliwe tylko w kropkach kwantowych. Układ nie ulega dysocjacji dlatego, że dodatkowa dziura nie ma możliwości ucieczki w żadnym z kierunków, a przesunięcie  $X^+$  ku fioletowi (1-10 meV) jest znacznie mniejsze od głębokości kropki (100-300 meV). Położenie linii trionów względem ekscytonu zostało następnie wyznaczone dla kropek o symetrii cylindrycznej [17A], w tym dla płaskich kropek o geometrii kropek samozorganizowanych. Pokazano, że wnioski dotyczące przesunięcia linii  $X^+$  powyżej linii ekscytonu uzyskane dla kropek sferycznych obowiązują również dla kropek samozorganizowanych [17A]. Zgodna z przewidywaniami pracy [16A] zmiana kolejności linii trionu dodatniego i ujemnego została zaobserwowana [71] w dużych naturalnych kropkach kwantowych powstałych w drucie kwantowym w obrębie defektu polegającego na lokalnie zwiększonej szerokości drutu. Przewidziana [16A, 17A] dla silnego uwięzienia kolejność linii  $X^-$ ,  $X$ ,  $X^+$  ( $\hbar\nu_{X^-} < \hbar\nu_X < \hbar\nu_{X^+}$ ) w widmie fotoluminescencyjnym małych - samozorganizowanych kropek kwantowych została zaobserwowana w pracach eksperymentalnych (por. np. [65] i [72]). W pracy [17A] rozważone zostały również triony w podwójnych sprzężonych pionowo kropkach kwantowych. Gdy linia  $X^+$  dla pojedynczej kropki jest przesunięta ku fioletowi względem  $X$ , dodanie drugiej kropki kwantowej zezwoli dodatkowej dziurze na ucieczkę od pary elektron-dziura [17A], od której jest efektywnie odpychana kulombowsko. Dokładnie taka sytuacja (linia  $X^+$  powyżej  $X$  dla pojedynczej kropki oraz stan podstawowy  $X^+$  z dziurami rozdzielonymi między kropki w układzie podwójnym) została wykryta doświadczalnie [65]. Zgodnie z pracą [15A] dysocjacja  $X^-$  przez pole elektryczne zachodzi w sposób ciągły ze wzrostem energii rekombinacji  $X^-$  z anomálną dodatnią krzywizną linii w funkcji pola gdy jeden z elektronów zostaje usunięty z głębszej z kropek. Przed i po usunięciu linia  $X^-$  przesuwa się z polem równoległe do linii  $X$ . Przewidywania te zostały precyzyjnie potwierdzone w przeprowadzonym bardzo niedawno doświadczeniu [73].

## 5 Podsumowanie i wnioski

Omówiony został cykl publikacji, których tematem są skorelowane własności układów nośników ładunku uwięzionych w kropkach kwantowych.

- Zbadano efekty korelacyjne w pionowej elektrostatycznej kropce kwantowej oraz ich

wpływ na okna transportu przez kropkę. Okazuje się, że zaniedbanie korelacji faworyzuje stany o wyższej wartości spinu w sekwencji symetrii stanów podstawowych pojawiających się w miarę wzrostu pola magnetycznego, co prowadzi do charakterystycznych odstępstw kształtu linii ładowania kropki w funkcji pola magnetycznego od danych doświadczalnych. Badania wykazały, że zaniedbanie korelacji ma wyraźniejsze konsekwencje dla dużych kropek kwantowych, ze słabszym potencjałem uwięzienia.

- Badania nad związkiem klasycznych i kwantowych molekuł Wignera utworzonych w zakresie ułamkowego efektu Halla, po rozpadzie kropli maksymalnej gęstości, doprowadziły do następujących wniosków: 1) W granicy silnego pola magnetycznego energia oddziaływania układu elektronów dąży do odpowiedniej wartości w klasycznej molekule Wignera. 2) Układy kwantowe realizują w laboratoryjnym układzie odniesienia klasyczny rozkład gęstości ładunku gdy jego symetria jest zgodna z symetrią potencjału uwięzienia. Układ dąży wtedy do granicy klasycznej w sposób gładki. 3) W przeciwnym wypadku, gdy klasyczny rozkład ładunku ma niższą symetrię niż potencjał uwięzienia (to jest – gdy istnieje kilka różnych lecz równoważnych rozkładów ładunku klasycznego o najniższej energii potencjalnej), klasyczna lokalizacja zachodzi tylko w funkcji względnych współrzędnych elektron-elektron. Obserwowana z zewnątrz gęstość ładunku jest superpozycją wszystkich równoważnych klasycznych rozkładów ładunku odtwarzającą symetrię potencjału zewnętrznego. Granica klasyczna dla kwantowo-mechanicznych wartości oczekiwanych osiągnana jest w sposób nieciągły poprzez szereg transformacji symetrii stanu podstawowego w zewnętrznym polu magnetycznym. 4) Przy transformacjach symetrii, to jest w warunkach przybliżonej degeneracji stanu podstawowego, układ jest bardzo podatny na słabe nawet zaburzenia, które ustalają orientację molekuly Wignera w laboratoryjnym układzie odniesienia. Przy słabym zaburzeniu przez odległy defekt naładowany pojawia się molekuly Wignera w układzie laboratoryjnym występuje tylko w wąskich zakresach pola magnetycznego (przy odpychaniu poziomów energetycznych) i powtarza się cyklicznie w miarę wzrostu pola magnetycznego. 5) Poza transformacjami symetrii układ reaguje na zewnętrzne zaburzenie jak ciecz elektronowa.

- Technicznym osiągnięciem pracy jest opracowanie nowej metody rachunkowej – wielocentrowej metody mieszania konfiguracji, która pozwoliła na zbadanie transformacji stanu podstawowego i krystalizacji wignerowskiej w kropkach o niskiej symetrii oraz w kropkach podwójnych.

- Wskazano możliwości optymalizacji energii wymiany w podwójnych, dwuelektronowych, sprzężonych bocznie kropkach kwantowych przez asymetrię potencjału uwięzienia, która faworyzuje podwójne obsadzenie głębszej kropki. W silnych polach magnetycznych podwójne obsadzenie głębszej z kropek następuje przy mniejszej asymetrii dla trypletu (gdy spiny elektronów są równoległe) niż dla singletu. Zbadano ewolucję symetrii układu trójelektronowego. Wskazano warunki, przy których w stanie stacjonarnym realizowany być może klasyczny rozkład ładunku między kropkami, łamiący symetrię parzystości. Pokazano, że międzykrop-

kowe korelacje elektron-elektron zachodzą również po wygaszeniu sprzężenia tunelowego. Przy szerokich barierach korelacje międzykropkowe znikają pomimo, że międzykropkowe sprzężenie elektrostatyczne jest wciąż wyraźne.

- W sprzężonych koncentrycznie układach kropka-pierścień i pierścień-pierścień potencjał wektorowy pola magnetycznego ( $\mathbf{A}$ ) indukuje transformacje momentu pędu w ramach mechanizmu oscylacji Aharonova-Bohma. Pole magnetyczne ( $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ) powoduje natomiast redystrybucję ładunku, która skutkuje modyfikacjami ułamkowego okresu oscylacji. W silnym polu rozkład ładunku między składowymi pierścieniowymi układów hybrydowych jest determinowany przez minimum klasycznej energii oddziaływania. Modyfikacje okresu Aharonova-Bohma mogą zostać zweryfikowane w pomiarach transportowych (oscylacje przewodności) lub w pomiarach pojemnościowych (odległości między wierzchołkami linii ładowania kropki w funkcji pola magnetycznego).

- Przedstawiono pierwsze studium efektów orbitalnych pola magnetycznego zorientowanego w płaszczyźnie kropki w zależności od jej kształtu. Dla realistycznej, płaskiej geometrii, wysoka wartość pola prowadzi ostatecznie do specyficznej formy krystalizacji wignerowskiej, w której wyspy ładunku jednoelektronowego rozciągnięte są w kierunku równoległym do wektora pola magnetycznego. Separacja ładunków jednoelektronowych powoduje, podobnie jak w kropkach podwójnych, degenerację orbitalnych energii singletu i trypletu związaną ze znikającym przekrywaniem funkcji jednoelektronowych. W kropkach sferycznych natomiast, rozdzielenie elektronów pod wpływem pola magnetycznego następuje we współrzędnych wewnętrznych. Jednoelektronowe wyspy ładunku w układzie laboratoryjnym nie powstają. Zamiast degeneracji singlet-tryplet obserwowane są oscylacje stanu spinowego związane z transformacjami momentu pędu (dla kropek ściśle sferycznych) lub parzystości (dla kropek o kształcie zbliżonym do sferycznego).

- W rozległych jednowymiarowych kropkach kwantowych krystalizacja wignerowska zachodzi z tworzeniem wysp ładunku jednoelektronowego w układzie laboratoryjnym, związana jest więc z przybliżoną degeneracją stanu podstawowego ze względu na spin. W każdym ze zdegenerowanych stanów krystalizacji wignerowskiej towarzyszy dalekozasięgowe uporządkowanie spinu we współrzędnych wewnętrznych układu. Na podstawie studium funkcji korelacji par wykazano, że przejście fazowe między cieczą elektronową a kryształem elektronowym ma charakter ciągły w funkcji długości kropki.

- Opisano wiązanie pary elektron-dziura w podwójnych samozorganizowanych kropkach kwantowych oraz jego zrywanie przez zewnętrzne pole elektryczne. Pokazano, że wywołanej polem elektrycznym dysocjacji ekscytonu towarzyszy anticrossing poziomów energetycznych stanu ciemnego i jasnego. Taki charakter efektu Starka dla podwójnych kropek został niedawno potwierdzony eksperymentalnie.

- Zbadano wpływ uwięzienia nośników w kropce kwantowej na położenie linii luminescencyjnych trionu dodatniego i ujemnego względem linii ekscytonu. Pokazano, że 1) nawet słabe



uwięzienie powoduje zmianę kolejności linii  $X^-$  i  $X^+$  względem kryształu litego 2) w granicy silnego uwięzienia, gdy efekty korelacyjne między nośnikami zostają stłumione, linia  $X^+$  ulega przesunięciu ku fioletowi powyżej linii  $X$ . Przewidziana dla silnego uwięzienia kolejność linii  $X^-$ ,  $X$  i  $X^+$  została potwierdzona eksperymentalnie w samozorganizowanych kropkach kwantowych. W pracy na temat trionów w podwójnych kropkach wskazano, że przesunięcie ku fioletowi linii  $X^+$  względem ekscytonu w pojedynczej kropce odpowiada rozdzielonym przestrzennie dziurom w układzie kropek podwójnych. Efekt ten został również pomyślnie zweryfikowany doświadczalnie. Precyzyjnie przewidziano zmierzony później kształt linii  $X^-$  w funkcji pola elektrycznego przy dysocjacji układu przez pole.

## 6 Literatura

### *Streszczony cykl publikacji*

- [1A] B. Szafran, S. Bednarek, J. Adamowski *Correlation effects in vertical gated quantum dots*, Phys. Rev. B **67**, 115323 (2003).
- [2A] B. Szafran, S. Bednarek, J. Adamowski *Magnetic-field-induced transformations of Wigner molecule symmetry in quantum dots*, Phys. Rev. B **67**, 045311 (2003).
- [3A] B. Szafran, S. Bednarek, J. Adamowski *Magnetic-field-induced phase transitions of Wigner molecules*, J.Phys.: Condens. Matter **15**, 4189 (2003).
- [4A] B. Szafran, S. Bednarek, J. Adamowski, M.B. Tavernier, E. Anisimovas, F.M. Peeters *Accuracy of the Hartree-Fock method for Wigner molecules at high magnetic fields*, Eur. Phys. J. D. **28**, 373 (2004).
- [5A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski *Anisotropic quantum dots: Correspondence between quantum and classical Wigner molecules, parity symmetry, and broken-symmetry states*, Phys. Rev. B **69**, 125344 (2004).
- [6A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski *Exact broken-symmetry states and Hartree-Fock solutions for quantum dots at high magnetic fields*, Physica E **26**, 252 (2005).
- [7A] B. Szafran, F.M. Peeters *Re-entrant pinning of Wigner molecules in a magnetic field due to a Coulomb impurity*, Europhys. Lett. **66**, 701 (2004).
- [8A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek *Exchange energy tuned by asymmetry in artificial molecules*, Phys. Rev. B **70**, 205318 (2004).
- [9A] B. Szafran, F.M. Peeters *Three-electrons in laterally coupled quantum dots: Tunnel vs electrostatic coupling, ground-state symmetry, and interdot correlations*, Phys. Rev. B **71**, 245314 (2005).

- [10A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek *Electron spin and charge switching in a coupled quantum-dot-quantum-ring system*; Phys. Rev. B **70**, 125310 (2004).
- [11A] B. Szafran, F.M. Peeters *Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings*, Phys. Rev. B **72**, 155316 (2005).
- [12A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski *In-plane magnetic-field-induced Wigner crystallization in a two-electron quantum dot*; Phys. Rev. B **70**, 235335 (2004).
- [13A] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski *Spatial ordering of charge and spin in quasi-one-dimensional Wigner molecules*, Phys. Rev. B **70**, 035401 (2004).
- [14A] B. Szafran, S. Bednarek, J. Adamowski *Parity symmetry and energy spectrum of excitons in coupled self-assembled quantum dots*, Phys. Rev. B **64**, 125301 (2001).
- [15A] B. Szafran, T. Chwiej, F. M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski, B. Partoens *Exciton and negative trion dissociation by an external electric field in vertically coupled quantum dots*, Phys. Rev. B **71**, 205316 (2005).
- [16A] B. Szafran, B. Stébé, J. Adamowski, S. Bednarek *Recombination energy for excitonic trions in quantum dots*, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 2453 (2000).
- [17A] B. Szafran, B. Stébé, J. Adamowski, S. Bednarek *Excitonic trions in single and double quantum dots*, Phys. Rev. B **66**, 165331 (2002).

### *Pozostałe artykuły z udziałem autora*

- [1B] S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski, B. Szafran *Artificial molecules in coupled and single quantum dots*, Phys. Rev. B **67**, 205316 (2003).
- [2B] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski *Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots*, Phys. Rev. B **64**, 195303 (2001).
- [3B] M.B. Tavernier, E. Anisimovas, F.M. Peeters, B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek *Four-electron quantum dot in a magnetic field*, Phys. Rev. B **68**, 115310 (2003).
- [4B] T. Stopa, B. Szafran, M.B. Tavernier, F.M. Peeters *Dependence of the vortex structure in quantum dots on the range of the inter-electron interaction*, Phys. Rev. B **73**, 075315 (2006).
- [5B] T. Prus, B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek *A classical model for the magnetic field-induced Wigner crystallization in quantum dots*, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 1425 (2004).
- [6B] S. Bednarek, B. Szafran, K. Lis *Electron soliton in semiconductor nanostructures*, Phys. Rev. B **72**, 075319 (2005).

- [7B] J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, S. Bednarek *Electron pair in a Gaussian confining potential*, Phys. Rev. B **62**, 4234 (2000).
- [8B] S. Bednarek, B. Szafran, K. Lis, J. Adamowski *Modeling of electronic properties of electrostatic quantum dots*, Phys. Rev. B **68**, 155333 (2003).
- [9B] B. Szafran, F.M. Peeters *Time-dependent simulations of electron transport through a quantum ring: Effect of the Lorentz force*, Phys. Rev. B **72**, 165301 (2005).
- [10B] B. Szafran, F.M. Peeters *Lorentz force induced asymmetry in the Aharonov-Bohm effect in a three terminal semiconductor quantum ring*, Europhys. Lett. **70**, 810 (2005).
- [11B] S. Bednarek, B. Szafran, T. Chwiej, J. Adamowski *Effective interaction for charge carriers confined in quasi-one-dimensional nanostructures*, Phys. Rev. B **68**, 045328 (2003).
- [12B] B. Szafran, T. Chwiej, F. M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski *Relative stability of negative and positive trions in model symmetric quantum wires*, Phys. Rev. B **71**, 235305 (2005).
- [13B] T. Chwiej, S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, F.M. Peeters *Broken one-particle symmetry in few-electron coupled quantum dots*, Phys. Rev. B **73**, 075422 (2006).

### *Prace innych autorów*

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots* ( Springer-Verlag, Berlin 1998).
- [2] M.A. Kastner, Ann. Phys. **9**, 885 (2000).
- [3] M.H. Devoret, R.J. Schoelkopf, Nature **406**, 1039 (2000).
- [4] F.R. Waugh i inni, Phys. Rev. Lett. **75**, 705 (1995).
- [5] D. Loss, D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [6] J.M. Elzerman i inni, Appl. Phys. Lett. **84**, 4617 (2004).
- [7] A.C. Johnson i inni, Nature **435**, 925 (2005).
- [8] F.H.L. Koppens i inni, Science **309**, 1346 (2005).
- [9] T.H. Oosterkamp i inni, Phys. Rev. Lett. **82**, 2931 (1999).
- [10] S. Viefers i inni, Physica E **21**, 1 (2004).
- [11] P. N. Prasad *Nanophotonics* (John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey 2004).
- [12] C.F. Klingshirn *Semiconductor Optics* (Springer-Verlag, Berlin 1997).
- [13] F. Troiani, U. Hohenester, E. Molinari, Phys. Rev. B **62**, R2263 (2000).
- [14] O. Gywat, G. Burkard, D. Loss, Phys. Rev. B **65**, 205329 (2002).
- [15] P. Michler i inni, Science **290**, 2282 (2000).
- [16] C.H. Bennet, Phys. Rev. Lett. **68**, 3121 (1992).

- [17] M.A. Kastner, Phys. Today **46**, 24 (1993).
- [18] S. Tarucha i inni, Phys. Rev. Lett. **77**, 3613 (1996).
- [19] L.P. Kouwenhoven i inni, Science **278**, 1788 (1997).
- [20] U.F. Keyser i inni, Phys. Rev. Lett. **90**, 196601 (2003).
- [21] R.J. Warburton i inni, Phys. Rev. B **58**, 16221 (1998).
- [22] N.B. Zhitenev i inni, Science **285**, 715 (1999).
- [23] N.B. Zhitenev i inni, Phys. Rev. Lett. **79**, 2308 (1997).
- [24] W.G. van der Wiel i inni, Rev. Mod. Phys. **75**, 1 (2003).
- [25] J.M. Elzerman i inni Appl. Phys. Lett. **84**, 4617 (2004).
- [26] A. Fuhrer i inni, Nature **413**, 822 (2001).
- [27] S.M. Reimann, M. Manninen, Rev. Mod. Phys. **74**, 1283 (2002).
- [28] P.A. Maksym i inni, J. Phys. Condens. Matter **12**, R299 (2000).
- [29] B. Reusch, H. Grabert, Phys. Rev. B **68**, 045309 (2003).
- [30] K. Jauregui, W. Häusler, B. Kramer, Europhys. Lett. **24**, 581 (1993).
- [31] W. Häusler, B. Kramer, Phys. Rev. B **47**, 16353 (1993).
- [32] G. Burkard, D. Loss, D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. B **59**, 2070 (1999).
- [33] X. Hu, S. Das Sarma, Phys. Rev. A **61**, 062301 (2000).
- [34] A. Harju, S. Siljamäki, R.M. Nieminen, Phys. Rev. Lett. **88**, 226804 (2002).
- [35] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- [36] E. Lieb, D. Mattis, Phys. Rev. **125**, 164 (1962).
- [37] P. Knowles, M. Schülz, H.-J. Werner, *Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry*, edited by J. Grotendorst, NIC Series, Vol. 3 (John von Neumann Institute of Computing, Jülich, 2000), strona 97.
- [38] A.H. MacDonald, S.R.E. Yang, M. D. Johnson, Aust. J. Phys. **46**, 345 (1993).
- [39] R.B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).
- [40] S. Ilani i inni, Nature (London) **427**, 328 (2004).
- [41] H.-M. Müller, S.E. Koonin, Phys. Rev. B **54**, 14532 (1996).
- [42] S.M. Reimann i inni, Phys. Rev. Lett. **83**, 3270 (1999).
- [43] K. Maki, X. Zotos, Phys. Rev. B **28**, 4349 (1983).
- [44] V.M. Bedanov, F.M. Peeters, Phys. Rev. B **49**, 2667 (1994).
- [45] M. Manninen i inni, Phys. Rev. B **64**, 245322 (2001).
- [46] E.S.R. Yang, A.H. MacDonald, Phys. Rev. B **66**, 041304 (2002).
- [47] C. Yannouleas, U. Landman, Phys. Rev. B **69**, 113306 (2004).
- [48] R. Ravishankar, i inni, Phys. Rev. B **69**, 035326 (2004).

- [49] M. Büttiker i inni, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [50] W.G. van der Wiel i inni, Phys. Rev. B **67**, 033307 (2003).
- [51] S. Pedersen i inni, Phys. Rev. B **61**, 5457 (2000).
- [52] A. Lorke i inni, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000).
- [53] T. Mano i inni, Nano Lett. **5**, 425 (2005).
- [54] T. Chakraborty, P. Pietiläinen, Phys. Rev. B **50**, 8460 (1994).
- [55] K. Niemiälä i inni, Europhys. Lett. **36**, 533 (1996).
- [56] J.A. Fokl i inni, Phys. Rev. Lett. **86**, 2102 (2001).
- [57] R.M. Potok i inni, Phys. Rev. Lett. **91**, 016802 (2003).
- [58] R. Hanson i inni, Phys. Rev. Lett. **91**, 196802 (2003).
- [59] Krzysztof Lis praca doktorska 'Elektrostatyczne potencjały uwięzienia w kropkach kwantowych', AGH Kraków 2006.
- [60] M.T. Björk i inni, Nano Lett. **2**, 82 (2002).
- [61] M.S. Gudiksen i inni, Nature **415**, 617 (2002).
- [62] E. Räsänen i inni, Phys. Rev. B **67**, 235307 (2003).
- [63] S. Fafard i inni, Appl. Phys. Lett. **76**, 2268 (2000).
- [64] H.J. Krenner i inni, Phys. Rev. Lett. **94**, 057402 (2005).
- [65] E.A. Stinaff i inni, Science **311**, 636 (2006).
- [66] P.W. Fry i inni, Phys. Rev. Lett. **84**, 733 (2000).
- [67] M.A. Lampert, Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1985).
- [68] B. Stébé, A. Ainane, Superlattices Microstruct. **5**, 545 (1989).
- [69] G. Finkelstein i inni, Phys. Rev. B **53**, R1709 (1996).
- [70] B. Stébé, G. Munschy, Solid State Commun. **17**, 1051 (1975).
- [71] T. Otterburg i inni, Phys. Rev. B **71**, 033301 (2005).
- [72] F. Guffarth i inni, Physica E **25**, 261 (2004).
- [73] H. J. Krenner i inni, cond-mat/0604659 (2006)