

ПАРНО-ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЙ ГАЗ ТЯЖЕЛЫХ ДЫРОК В СИЛЬНО-ВЫТЯНУТОЙ ЭЛЛИпсоИДАЛЬНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ: ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

М.А. МКРТЧЯН, Е.Ш. МАМАСАХЛИСОВ, А.А. САРКИСЯН*

Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

*e-mail: hayk.sarkisyan@rau.am

(Поступила в редакцию 4 октября 2023 г.)

В адиабатическом приближении исследован несколько частичный парно-взаимодействующий газ тяжелых дырок, локализованный в сильно-вытянутой эллипсоидальной квантовой точке Ge/Si. Потенциал межчастичного взаимодействия рассматривается в рамках одномерной модели атома Мошинского, когда взаимодействие зависит от квадрата расстояния между частицами. В рамках Больцмановского приближения аналитически вычислена статистическая сумма несколько частичного дырочного газа. Исследованы основные термодинамические параметры системы, такие как средняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость. Показано, что учет межчастичного взаимодействия приводит к упорядочиванию системы, что, в частности, отражается на энтропии газа.

1. Введение

Электронный (дырочный) газ, локализованный в квантовой точке (КТ), всегда был предметом широкого интереса теоретиков и экспериментаторов. Благодаря эффекту размерного квантования, наиболее ярко проявляющемуся в КТ, многочастичный спектр становится гибко управляемым, что отражается на всех характеристиках электронного газа: оптических, термодинамических, магнитных и т. д. [1–7]. Примером может служить обобщение теоремы Кона для несколькочастичного газа, локализованного в параболической КТ, когда специфический вид ограничивающего потенциала КТ приводит к реализации одночастичных переходов в многочастичной системе, под действием длинноволнового возмущения [8–10].

Наряду с оптическими характеристиками представляет интерес изучение термодинамических свойств электронного (дырочного) газа, локализованного в КТ различных геометрических форм и размеров. Статистическая сумма в КТ с относительно простой геометрией (сферической или цилиндрической) и слабым межчастичным взаимодействием, может быть вычислена аналитически точно [11–17]. В работе [12] авторы исследовали термодинамические и магнитные свойства слабовзаимодействующего электронного газа, локализованного в цилиндрическом нанослое в присутствии аксиального магнитного поля. В качестве радиального потенциала ограничения был выбран двумерный потенциал Винтерница–Смородинского. Было показано, что газ обладает диамагнитными свойствами, а намагнитченность практически линейно зависит от магнитного

поля. Изучались зависимости энтропии, теплоемкости и средней энергии системы от магнитного поля. В частности, было показано, что энтропия системы увеличивается с увеличением магнитного поля.

Ясно, что для нетривиальных геометрий КТ расчет статистической суммы является более сложной задачей, и приходится прибегать к приближенным или численным методам [18–22]. В работе [19] были определены собственные состояния и уровни энергии носителей заряда, заключенных в квантовом кольце в однослойном графене под действием приложенного магнитного поля. Определены энтропия, теплоемкость и восприимчивость системы. Результаты показали, что термодинамические величины имеют периодическое поведение с увеличением внешнего магнитного поля. В частности, теплоемкость, демонстрировала эффект аномалии Шоттки.

Существенным образом повлиять на термодинамические свойства локализованного в КТ газа может учет межчастичного взаимодействия [23–25]. В работе [24] было представлено теоретическое исследование влияния гармонического электрон-электрон взаимодействия на термодинамические свойства одномерной параболической КТ. Были рассчитаны средняя энергия, теплоемкость, свободная энергия Гельмгольца и энтропия системы, с использованием подхода канонического ансамбля. Авторы показали, что при малых температурах средняя энергия медленно растет с температурой, но при дальнейшем повышении температуры средняя энергия перестает зависеть от межчастичного взаимодействия и растет быстрее.

Между тем термодинамические свойства КТ с нетривиальной геометрией и учетом межчастичного взаимодействия изучены сравнительно слабо. Поэтому возникает интерес к более детальному исследованию поведения взаимодействующего электронного (дырочного) газа в сильно-вытянутой эллипсоидальной КТ. Целью данной работы является теоретическое исследование термодинамических свойств (средняя энергия, свободная энергия, энтропия и теплоемкость), парно-взаимодействующего дырочного газа, локализованного в сильно-вытянутой эллипсоидальной КТ Ge/Si.

2. Теория

Рассмотрим несколько частичный газ тяжелых дырок, локализованных в сильно-вытянутой эллипсоидальной КТ Ge/Si, со следующим потенциалом взаимодействия

$$\hat{V}_{\text{conf}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} \leq 1 \\ \infty, & \frac{x^2 + y^2}{a^2} + \frac{z^2}{c^2} > 1 \end{cases}, \quad a \ll c, \quad (1)$$

где a и c — малая и большая полуоси сильно-вытянутой эллипсоидальной КТ.

Ясно, что в радиальном направлении размерное квантование существенно сильнее межчастичного взаимодействия, поэтому с большой точностью можно рассматривать межчастичное взаимодействие только в аксиальном направлении

$$V_{\text{int}}(1, \dots, N) = \sum_{i < j}^N v(|z_i - z_j|). \quad (2)$$

В работе [10] на основе адиабатического приближения было показано, что в

аксиальном направлении для N -частичного гамильтониана можно записать

$$\hat{H}(1, \dots, N) = \frac{1}{2m^*} \sum_{j=1}^N \hat{p}_{z_j}^2 + \frac{m^* \Omega^2}{2} \sum_{j=1}^N z_j^2 + \sum_{i < j}^N v(|z_i - z_j|), \quad (3)$$

где $\Omega = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar \alpha_{1,0}}{m^* a c}$, $\alpha_{1,0}$ – нули функции Бесселя первого рода, m^* – эффективная масса тяжелых дырок, N – число частиц в КТ.

В общем случае гамильтониан (3) довольно сложно диагонализировать. Но есть довольно удобное приближение для парно-взаимодействующего газа, которое позволяет дать аналитические, точные решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (3). Данное приближение было предложено М.Мошинским для описания ядерно-физических задач [26–28], когда потенциал межчастичного взаимодействия задается в следующем виде

$$V_{\text{int}}(1, \dots, N) = \gamma \sum_{i < j}^N (z_i - z_j)^2, \quad (4)$$

где γ – параметр взаимодействия, вычисленный путем сравнения с точным кулоновским потенциалом.

Уравнение Шредингера с гамильтонианом (3), содержащим потенциал взаимодействия (4), обсуждалось в работе [10], и для энергетического спектра было получено:

$$E_{n_{cm}, \{n_{rel_i}\}} = NE_0 + \hbar \Omega \left(n_{cm} + \frac{1}{2} \right) + \hbar \Omega \tilde{\Omega} \sum_{i=2}^N \left(n_{rel_i} + \frac{1}{2} \right), \quad (5)$$

где E_0 – энергия основного состояния, $\tilde{\Omega} = \sqrt{1 + \frac{2N\gamma}{m^* \Omega^2}}$, $\{n_{cm}, n_{rel_i}\}$ – квантовые числа для уровней центра масс и относительного движения.

На основе полученных результатов можно провести детальное аналитическое исследование термодинамических характеристик рассматриваемого дырочного газа.

Статистическая сумма имеет вид

$$Z = \sum_v \exp(-\beta E_v), \quad (6)$$

где $\beta = 1/(k_B T)$ – обратная температура, v – набор квантовых чисел, характеризующих спектр газа.

Для N -частичной системы статистическая сумма может быть переписана в следующей форме:

$$Z(N) = Z_0 Z_{CM} Z_{rel}. \quad (7)$$

Принимая во внимание выражение (6) и подставляя значение энергетического спектра (5) получим

$$\begin{aligned} Z_0 &= \exp(-N\beta E_0); \\ Z_{CM} &= \sum_{n_{cm}} \exp\left(-\beta \hbar \Omega \left(n_{cm} + \frac{1}{2}\right)\right); \\ Z_{rel} &= \sum_{n_{rel}} \exp\left(-\beta \hbar \Omega \tilde{\Omega} \sum_{i=2}^N \left(n_{rel_i} + \frac{1}{2}\right)\right) = \left(\sum_{n_{rel}} \exp\left(-\beta \hbar \Omega_{n_z=1} \tilde{\Omega} \left(n_{rel} + \frac{1}{2}\right)\right) \right)^{N-1}. \end{aligned} \quad (8)$$

Чтобы посчитать $Z(N)$, нам необходимо рассчитать следующие суммы

$$Z_{CM} = \sum_{n_{cm}} \exp\left(-M\left(n_{cm} + \frac{1}{2}\right)\right),$$

$$Z_{rel} = \left(\sum_{n_{rel}} \exp\left(-M\tilde{\Omega}\left(n_{rel} + \frac{1}{2}\right)\right)\right)^{N-1},$$
(9)

где $M = \hbar\Omega/(k_B T)$.

Реализуя суммирование для Z_{CM} и Z_{rel} , получим

$$Z_{CM} = \frac{e^{M/2}}{e^M - 1}, \quad Z_{rel} = \left(\frac{e^{M\tilde{\Omega}/2}}{e^{M\tilde{\Omega}} - 1}\right)^{N-1}.$$
(10)

Таким образом, для $Z(N)$ можем записать:

$$Z(N) = e^{-\frac{NE_0}{k_B T}} \frac{e^{\frac{\hbar\Omega}{2k_B T}}}{e^{\frac{\hbar\Omega}{k_B T}} - 1} \left(\frac{e^{\frac{\hbar\Omega\tilde{\Omega}}{2k_B T}}}{e^{\frac{\hbar\Omega\tilde{\Omega}}{k_B T}} - 1}\right)^{N-1}.$$
(11)

Принимая во внимание выражение для статистической суммы (11), можно вычислить основные термодинамические параметры системы, такие как средняя

энергия $\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$, свободная энергия $\langle F \rangle = -\frac{\ln Z}{\beta}$, энтропия $S = -\frac{\partial \langle F \rangle}{\partial T}$ и

теплоемкость $C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$.

3. Обсуждение результатов

На рис.1 показаны зависимости средней энергии газа тяжелых дырок от температуры и параметра взаимодействия для трех-, четырех- и пятичастичного газов. Как и ожидалось наблюдается рост средней энергии с ростом температуры. Также наблюдается рост средней энергии и при увеличении числа частиц в КТ. Эффект взаимодействия приводит к росту средней энергии газа, но при этом данный вклад существеннее, чем в случае температуры.

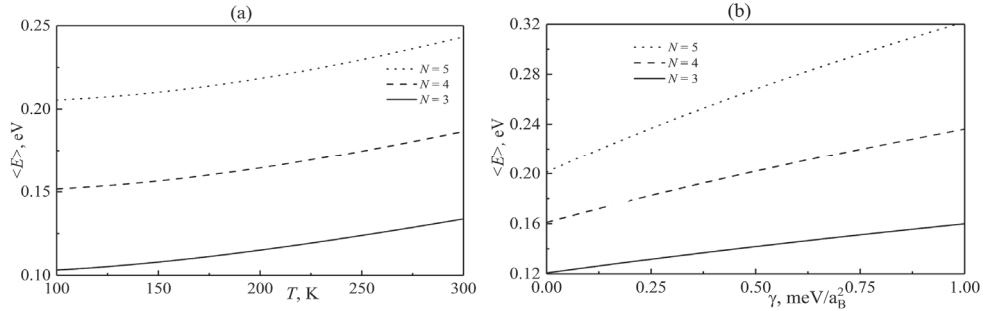


Рис.1. Зависимость средней энергии несколько частичного парно-взаимодействующего газа тяжелых дырок от (а) абсолютной температуры ($\gamma = 0.3 \text{ meV}/a_B^2$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) и (б) параметра взаимодействия ($T = 300\text{K}$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) при различных значениях числа частиц.

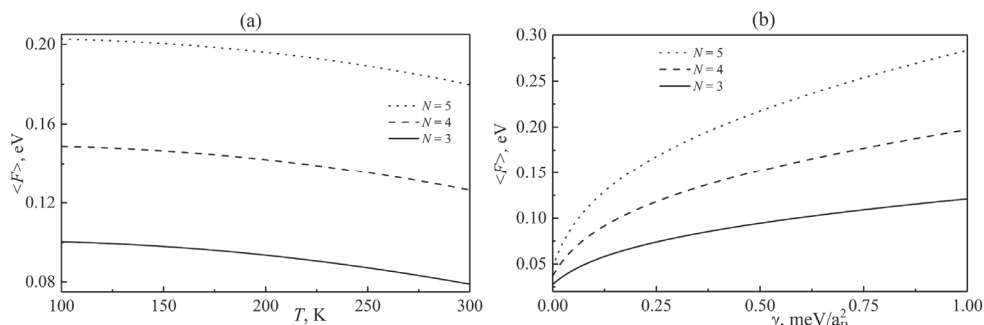


Рис.2. Зависимость свободной энергии несколько частичного парно-взаимодействующего газа тяжелых дырок от (а) абсолютной температуры ($\gamma = 0.3 \text{ meV}/a_B^2$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) и (b) параметра взаимодействия ($T = 300\text{K}$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) при различных значениях числа частиц.

На рис.2 показаны зависимости свободной энергии газа тяжелых дырок от температуры и параметра взаимодействия. В данном случае поведение свободной энергии абсолютно аналогично поведению средней энергии, при росте числа частиц и постоянной температуре, но при этом рост температуры приводит к спаду свободной энергии, так как $\langle F \rangle = \langle E \rangle - TS$, а при росте температуры растет и средняя энергия $\langle E \rangle$ и энтропия S (см. табл.1 и рис.3). При этом видно, что при постоянной температуре и росте параметра взаимодействия вклад средней энергии $\langle E \rangle$ больше вклада TS , вследствие чего свободная энергия возрастает.

Табл.1. Изменение $\langle E \rangle$, TS и $\langle F \rangle$ при различных температурах от 100 до 300 К

T , К	$\langle E \rangle$, eV	TS , eV	$\langle F \rangle$, eV
100	0.20547	0.00278	0.20269
150	0.21021	0.0098	0.2004
200	0.2184	0.0229	0.196
250	0.2297	0.4054	0.18915
300	0.24337	0.6358	0.1798

На рис.3 показаны зависимости энтропии газа тяжелых дырок от температуры и параметра взаимодействия при различных значениях числа частиц. При увеличении температуры наблюдается резкий рост энтропии, из-за роста теплового движения частиц. Аналогичный вклад имеет и рост числа частиц. С другой стороны, из рисунка видно, что рост параметра взаимодействия приводит к существенному снижению энтропии в начале и последующему насыщению при относительно больших межчастичных взаимодействиях ($\gamma > 1$), тем самым стабилизируя и упорядочивая систему.

На рис.4 показаны зависимости теплоемкости газа тяжелых дырок от температуры и параметра взаимодействия при различных значениях числа частиц, соответственно. Вклад взаимодействия (при постоянной комнатной температуре) в теплоемкость отрицательный, и теплоемкость падает, этого и следовало ожидать, так как с ростом параметра взаимодействия γ , частицы чувствуют друг друга лучше (вследствие чего мы наблюдаем ослабление зависимости теплоемкости

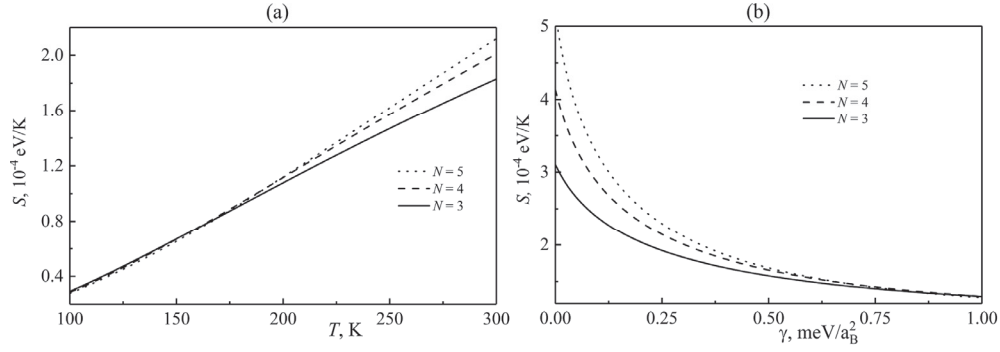


Рис.3. Зависимость энтропии несколько частичного парно-взаимодействующего газа тяжелых дырок от (а) абсолютной температуры ($\gamma = 0.3 \text{ meV}/a_B^2$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) и (б) параметра взаимодействия ($T = 300\text{K}$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) при различных значениях числа частиц.

от числа частиц в газе), и теплообмен становится более интенсивным. Эффект же температуры противоположный: с ростом температуры и числа частиц мы наблюдаем рост теплоемкости, так как при температуре 300 K, системе необходимо дать больше тепла, чтобы повысить ее температуру на 1 K, чем при температуре 200 K.

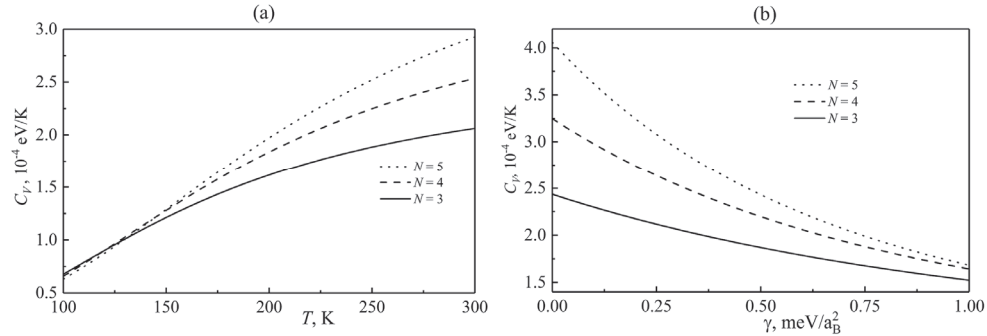


Рис.4. Зависимость теплоемкости несколько частичного парно-взаимодействующего газа тяжелых дырок от (а) абсолютной температуры ($\gamma = 0.3 \text{ meV}/a_B^2$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) и (б) параметра взаимодействия ($T = 300\text{K}$, $a = 1a_B$, $c = 3a_B$) при различных значениях числа частиц.

4. Заключение

В адиабатическом приближении исследован несколькочастичный парно-взаимодействующий газ тяжелых дырок, локализованный в сильно-вытянутой Ge/Si эллипсоидальной КТ. В рамках Больцмановского приближения аналитически вычислена статистическая сумма для точно решаемой модели несколькочастичного дырочного газа, с учетом межчастичного парного взаимодействия, в рамках одномерной модели Мошинского. На основе этого исследованы основные термодинамические параметры системы. Получено, что с ростом температуры наблюдается рост средней энергии и спад свободной энергии рассматриваемого газа. Рост межчастичного взаимодействия стабилизирует систему, и, после

резкого спада при относительно небольших взаимодействиях, наблюдается насыщение энтропии при последующем увеличении межчастичного взаимодействия ($\gamma > 1$). Аналогичное влияние оказывает межчастичное взаимодействие на теплоемкость системы.

Работа выполнена при поддержке Комитета по науке РА и Российского фонда фундаментальных исследований в рамках совместных научных проектов SCS 20RF-041 и RFBR 20-52-05004, соответственно.

ЛИТЕРАТУРА

1. **I. Kulesh, C.T. Ke, C. Thomas, S. Karwal, C.M. Moehle, S. Metti.** Phys. Rev. Applied, **13**, 041003 (2020).
2. **J.M. Elzerman, R. Hanson, J.S. Greidanus, L.W. Van Beveren, S. De Franceschi, L.M. Vandersypen, K. Vandersypen, S. Tarucha, L.P. Kouwenhoven.** Phys. Rev. B, **67**, 161308 (2003).
3. **L.J. Klein, K.A. Slinker, J.L. Truitt, S. Goswami, K.L. Lewis, Coppersmith.** Appl. Phys. Lett. **84**, 4047 (2004).
4. **H. Sakaki, G. Yusa, T. Someya, Y. Ohno, T. Noda, H. Akiyama,** Appl. Phys. Lett., **67**, 3444 (1995).
5. **M.A. Mkrtchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, D.A. Firsov, M.Y. Vinnichenko.** International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies (YETI): Springer Proceedings, St. Petersburg (pp. 169 – 175). Springer International Publishing, 2021.
6. **M. Dineykhon, R.G. Nazmitdinov.** Phys. Rev. B, **55**, 13707 (1997).
7. **D.A. Baghdasaryan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Phys. E, **101**, 1 (2014).
8. **F.M. Peeters.** Phys. Rev. B, **42**, 1486 (1990).
9. **P.A. Maksym, T. Chakraborty.** Phys. Rev. Lett, **65**, 108 (1990).
10. **D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, M.A. Mkrtchyan, H.A. Sarkisyan.** Nanomaterials, **10**, 1896 (2020).
11. **S. Gumber, M. Kumar, M. Gambhir, M. Mohan, P.K. Jha.** Canadian Jour. Phys., **93**, 1264 (2015).
12. **H.T. Ghaltaghchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan.** Micro and Nanostr., **174**, 207471 (2023).
13. **A.A. Alia, M.K. Elsaid, A. Shaer.** Jour. Taibah Univ. Sci., **13**, 687 (2019).
14. **S. Gumber, M. Kumar, P.K. Jha, M. Mohan.** Chin. Phys. B, **25**, 056502 (2016).
15. **B. Boyacioglu, A. Chatterjee.** Phys. E, **44**, 1826 (2016).
16. **L.M. Taguefouet, M. Silenou, A.J. Fotue.** Jour. Low Temp. Phys., **203**, 112 (2021).
17. **A.G.J. Vicente, L.B. Castro, A.E. Obispo, L.E.A. Meza.** Jour. Low Temp. Phys., **202**, 372 (2021).
18. **J.J. Calvin, E.A. O'Brien, A.B. Sedlak, A.D. Balan, A.P. Alivisatos.** ACS Nano, **15**, 1407 (2021).
19. **R. Khordad, H.R. Sedehi, M. Sharifzadeh.** Jour. Comp. Elect., **21**, 422 (2022).
20. **R. Khordad, H.R. Sedehi.** Jour. Low Temp. Phys., **190**, 200 (2018).
21. **Y. Dong, T. Qiao, D. Kim, D. Parobek, D. Rossi, D.H. Son.** Nano Lett., **18**, 3716 (2018).

22. **L.M. Taguefouet, M.S. Mengoue, A.J. Fotue, M.F.C. Fobasso.** Eur. Phys. Jour. Plus, **137**, 1 (2022).
23. **L.D. da Silva, N. Studart.** Phys. Rev. B, **71**, 113302 (2005).
24. **F.S. Nammas.** Phys. A, **508**, 187 (2018).
25. **A. Ghanbari, R. Khordad, F. Taghizadeh.** Chem. Phys. Lett., **801**, 139725 (2022).
26. **M.A. Mkrtchyan, D.B. Hayrapetyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, S. Baskoutas, D.A. Firsov, M.Y. Vinnichenko.** Phys. E, **150**, 115703 (2023).
27. **M. Moshinsky.** American Jour. Phys., **36**, 52 (1968).
28. **N.F. Johnson, M.C. Payne.** Phys. Rev. Lett., **67**, 1157 (1991).

ԶՈՒՅԳ ՓՈԽԱԶԴՈՂ ԾԱՆՐ ԽՈՌՈՉԱՅԻՆ ԳԱԶԸ ԽԻՍՏ ԶԳՎԱԾ
ԷԼԻՊՍԱՐԴԱՅԻՆ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԵՏՈՒՄ.
ԹԵՐՄՈՂԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

Մ.Ա. ՄԿՐՏՅԱՆ, Ե.Շ. ՄԱՄԱՍԱԽԼԻՍՈՎ, Հ.Ա. ՍԱՐԳՍՅԱՆ

Ադիաբատաին մոտ ավորությամբ ուսումնասիրվել է մի քանի մասնիկային գույգ փոխազդող ծանր խոռոչների գազ, որը տեղայնացված է խիստ ձգված Ge/Si էլիպսարդային քվանտային կետում: Միջմասնիկային փոխազդեցությունը դիտարկվում է Մոշինսկու միաչափ մոդելի շրջանակներում, երբ փոխազդեցությունը կախված է մասնիկների միջև հեռավորության քառակուսուց: Բոլցմանի մոտավորությամբ անալիտիկորեն ստացվում է խոռոչային գազի վիճակագրական ֆունկցիան: Ուսումնասիրված են համակարգի հիմնական թերմոդինամիկական պարամետրերը, ինչպիսիք են միջին էներգիան, ազատ էներգիան, էնտրոպիան և ջերմունակությունը: Ցույց է տրված, որ միջմասնիկային փոխազդեցությունը հաշվի առնելը հանգեցնում է համակարգի դասավորությանը, ինչը, մասնավորապես, ազդում է գազի էնտրոպիայի վրա:

PAIR-INTERACTING HEAVY HOLES GAS IN A STRONGLY PROLATE ELLIPSOIDAL QUANTUM DOT: THERMODYNAMIC PROPERTIES

M.A. MKRTCHYAN, Y.S. MAMASAKHLISOV, H.A. SARKISYAN

In the frame of adiabatic approximation a few-particle pair-interacting heavy holes gas localized in a strongly oblate Ge/Si ellipsoidal quantum dot has been studied. The interparticle interaction potential is considered within the framework of the one-dimensional Moshinsky atom model when the interaction depends on the square of the distance between particles. Within the framework of the Boltzmann approximation, the partition function of a few-particle hole gas is analytically obtained. The main thermodynamic parameters of the system, such as mean energy, free energy, entropy, and heat capacity, have been investigated. It is shown that taking into account interparticle interaction leads to ordering of the system, which, in particular, affects the entropy of the gas.