

ДВУМЕРНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ В СПИРАЛЬНО СВЕРНУТЫХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

*А. И. Ведерников, А. В. Чаплик**

*Новосибирский государственный университет
630090, Новосибирск, Россия*

*Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 1 сентября 1999 г.

Найден эффективный гамильтониан, описывающий движение одномерной квантовой частицы вдоль произвольной плоской кривой. Рассчитаны энергетические уровни и поляризационная зависимость поглощения электромагнитной волны в спирально свернутой квантовой яме.

PACS: 73.20.Dx

1. ВВЕДЕНИЕ

Успехи современной технологии наноструктур позволяют создавать системы довольно сложной геометрической формы. Характерным примером являются так называемые «квантовые рулоны», получаемые по оригинальной методике, развитой в работах [1, 2]. Напряженная структура, состоящая из квантовых пленок различных материалов (например, GaAs/InAs), после освобождения от подложки сворачивается вследствие релаксации упругих напряжений, как это схематически показано на рис. 1. Двумерный электронный газ в одном из слоев оказывается, таким образом, на цилиндрической поверхности, сечение которой достаточно хорошо аппроксимируется спиралью Архимеда: $\rho = L\varphi$, где ρ и φ — цилиндрические координаты в плоскости перпендикулярной оси цилиндра z . Варьируя толщины слоев и рассогласование решеток исходных материалов можно практически непрерывно менять радиус кривизны получаемой структуры в интервале от нескольких десятков ангстрем до нескольких микрон. Такую систему будем называть спирально свернутой квантовой ямой. В настоящем сообщении исследуются ее электронные свойства: энергетический спектр и оптическое поглощение в ИК-области. Подчеркнем сразу характерную особенность, отличающую данную систему от плоских квантовых ям и от нанотрубок: рассматриваемая система неоднородна вдоль одного из направлений цилиндрической

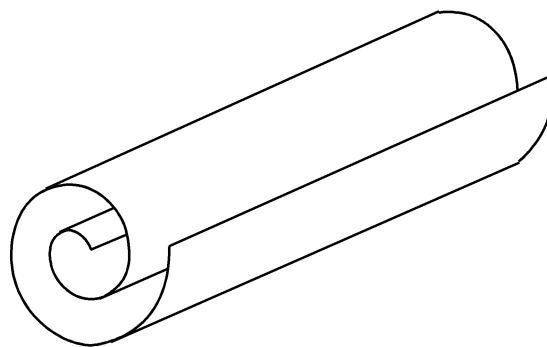


Рис. 1. «Квантовый рулон» — спирально свернутая пленка

поверхности и, следовательно, анизотропна в целом в плоскости XU . Последнее обстоятельство проявляется в поляризационных зависимостях оптического поглощения.

2. ЭФФЕКТИВНЫЙ ОДНОМЕРНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Поскольку полная волновая функция зависит от координаты z по типу плоской волны, задача сводится к движению электрона в плоском спиральном волноводе. Предполагая толщину исходной квантовой пленки δ малой по сравнению с продольной деброевской длиной волны (двумерный предел), мы должны считать движение поперек волновода быстрым по сравнению с движением вдоль него. Применим известный метод адиабатического разделе-

*E-mail: chaplik@isp.nsc.ru

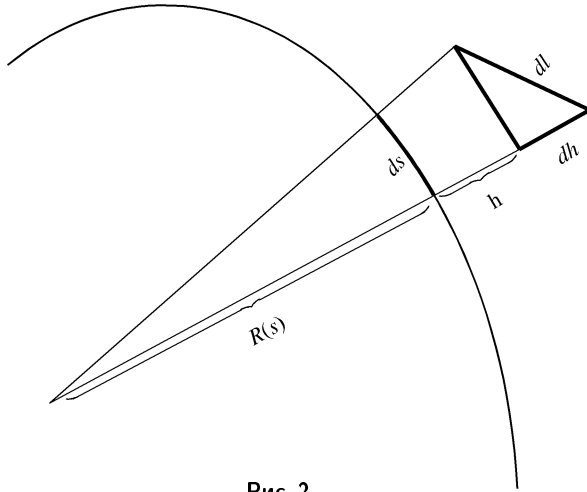


Рис. 2.

ния быстрых и медленных степеней свободы и получим эффективное одномерное волновое уравнение.

Рассмотрим сначала общую задачу о движении квантовой частицы вдоль произвольной плоской кривой. Уравнение кривой запишем в параметрической форме:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(s),$$

где \mathbf{r} — плоский вектор (x, y) , s — длина дуги, отсчитанная от некоторой начальной точки кривой. Введем новые переменные h и s вместо x, y (рис. 2), где h отсчитывается по нормали к кривой так, чтобы орты новых координат (h, s, z) образовывали правую тройку векторов $(\mathbf{e}_h, \mathbf{e}_s, \mathbf{e}_z) = 1$. Квадрат элемента длины в новых координатах равен

$$dl^2 = dh^2 + H_s^2 ds^2, \quad H_s = 1 + h/R(s), \quad (1)$$

где $R(s)$ — радиус кривизны. Очевидно, что координаты h и s ортогональны, и что их можно однозначно ввести для достаточно малых h . Данное ограничение не играет роли в дальнейшем, так как нас будет интересовать область $0 < h < \delta$ (в пределе $\delta \rightarrow 0$).

Запишем теперь уравнение Шредингера в новых переменных, учитывая также однородное магнитное поле, параллельное оси цилиндра. Выберем симметричную калибровку вектор-потенциала: $\mathbf{A} = [\mathbf{B}\mathbf{r}]/2$. В переменных h, s, z получим

$$\begin{aligned} A_s &= \frac{1}{2}Bh + \frac{1}{2}B\dot{\mathbf{r}}(s)[\mathbf{e}_z\mathbf{r}(s)], \\ A_h &= -\frac{1}{2}B\dot{\mathbf{r}}(s) \cdot \mathbf{r}(s), \\ A_z &= 0, \end{aligned} \quad (2)$$

где точка над вектором означает производную по s , \mathbf{e}_z — единичный вектор вдоль оси z . Условие $\text{div } \mathbf{A} = 0$ принимает вид

$$\frac{\partial A_s}{\partial s} + \frac{A_h}{R(s)} = 0. \quad (3)$$

Уравнение Шредингера ($\hbar = 1$):

$$-\frac{1}{2m} \left\{ \frac{1}{H_s} \frac{\partial}{\partial h} \left(H_s \frac{\partial \Psi}{\partial h} \right) + \frac{1}{H_s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{H_s} \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right) \right\} + \frac{ie}{mc} \left(\frac{A_s}{H_s} \frac{\partial \Psi}{\partial s} + A_h \frac{\partial \Psi}{\partial h} \right) + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2mc^2} \Psi = E\Psi. \quad (4)$$

На границах волновода $h = 0, h = \delta$ волновая функция обращается в нуль: $\psi(s, 0) = \psi(s, \delta) = 0$. Согласно адиабатическому приближению фиксируем s , а движение по координате h описываем волновой функцией прямоугольной ямы с твердыми стенками (для устранения первой производной по h эту функцию нужно еще домножить на $1/\sqrt{H_s}$). Далее совершим калибровочное преобразование, позволяющее исключить магнитное поле в пределе $\delta \rightarrow 0$. Окончательный вид полной волновой функции следующий:

$$\begin{aligned} \Psi(h, s) &= \sqrt{\frac{2}{\delta}} \frac{1}{\sqrt{H_s}} \sin \frac{\pi h}{\delta} \exp \left\{ -i \frac{eBh}{2c} \dot{\mathbf{r}}(s) \cdot \mathbf{r}(s) \right\} \times \\ &\times \exp \left[i \frac{e}{c} \int_{s_0}^s A_0 ds \right] \chi(s). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь

$$A_0 = A_s(s, h = 0) \equiv \frac{1}{2}B\dot{\mathbf{r}}(s)[\mathbf{e}_z\mathbf{r}(s)],$$

s_0 — произвольное начало отсчета длины дуги, $\chi(s)$ — адиабатическая волновая функция продольного движения. Уравнение для нее получается обычным образом: надо усреднить уравнение (4) по основной моде поперечного движения (с весом H_s). После довольно длинного вычисления, полагая везде, где это возможно, $\delta = 0$, получим:

$$-\frac{1}{2m} \frac{d^2 \chi}{ds^2} - \frac{1}{8mR^2(s)} \chi = E_{\parallel} \chi, \quad (6)$$

где $E_{\parallel} = E - \pi^2/2m\delta^2$ — энергия продольного движения.

Таким образом, адиабатический потенциал одномерного электрона на кривой линии соответствует притяжению к местам наибольшей кривизны. Магнитное поле входит только в фазу волновой функции, поэтому уровни энергии могут зависеть от поля только для замкнутых кривых, когда Ψ удовлетворяет условию периодичности (при этом в ответ входит лишь магнитный поток через контур). В частности, электрон в спирали со свободными концами не «чувствует» магнитного поля перпендикулярно ее плоскости независимо от числа оборотов спирали (нет захваченного потока).

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ СПИРАЛИ АРХИМЕДА. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ

Компактная форма уравнения (6) полезна для анализа общих свойств энергетического спектра. Например, легко установить, что для спирали Архимеда число связанных состояний бесконечно, так как асимптотика адиабатического потенциала кулоновская $U(s \rightarrow \infty) \approx 1/16mLs$. Для квантовой проволоки, изогнутой в форме параболы или гиперболы, получается соответственно $U \sim 1/s^3$ и $U \sim 1/s^6$.

Однако из-за сложного вида зависимости $R(s)$ для получения количественных результатов удобнее перейти к другой переменной. Мы провели численный расчет энергетических уровней и волновых функций для спирали Архимеда $\rho = L\varphi$, введя в качестве аргумента волновой функции полярный угол φ . В нулевом порядке по параметру δ/L уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{1}{1 + \varphi^2} \frac{d^2\chi}{d\varphi^2} + \frac{2\varphi}{(1 + \varphi^2)^2} \frac{d\chi}{d\varphi} - \frac{2 + 9\varphi^2 + \varphi^4}{4(1 + \varphi^2)^3} \chi = 2mL^2 E_{\parallel} \chi \equiv \varepsilon \chi. \quad (7)$$

Граничные условия соответствуют обращению χ в нуль в конечных точках спирали, т.е. при $\varphi = 0$ и $\varphi = \varphi_{max}$; выбирались значения $\varphi_{max} = 2\pi, 4\pi, 6\pi$. Уравнение (7) преобразовывалось к разностному, и задача сводилась к нахождению собственных значений и собственных векторов соответствующей матрицы. За нуль отсчета энергии выбрано дно первой подзоны поперечного квантования (см. (6)). Для спирали с одним, двумя и тремя оборотами ($\varphi_{max} = 2\pi, 4\pi, 6\pi$) значения первых трех уровней энергии приведены в таблице.

Отрицательным энергиям соответствуют состояния, локализованные вблизи начала спирали; число таких состояний, естественно, увеличивается с ростом ее длины. Для спирали с минимальным радиусом кривизны $R_{min} = L/2 = 50 \text{ \AA}$ глубина основного уровня составляет 0.7 К.

ε	φ_{max}		
	2π	4π	6π
ε_1	-0.001877	-0.007305	-0.007306
ε_2	0.05656	-0.00019	-0.0013
ε_3	0.1600	0.006223	-0.00005

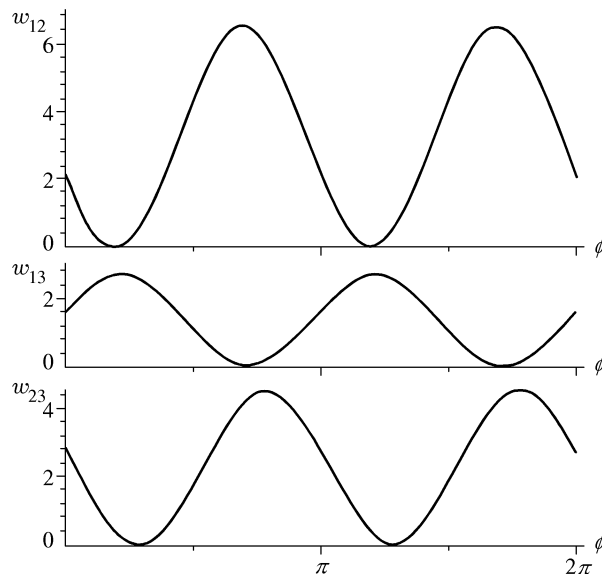


Рис. 3.

4. ИК-ПОГЛОЩЕНИЕ

Пусть электромагнитная волна распространяется вдоль оси спирали Z . Переходы между найденными выше уровнями определяются компонентой электрического поля волны касательной к спирали. Ясно, что из-за неоднородности системы по φ следует ожидать сильной поляризационной зависимости интенсивности ИК-поглощения. Численно были рассчитаны вероятности переходов между тремя низшими уровнями, w_{12}, w_{13}, w_{23} . Их зависимости от угла ϕ между электрическим вектором волны и осью X (т.е. касательной к спирали в ее начале при $\varphi = 0$) приведены на рис. 3 для спирали с тремя оборотами.

Отметим, что для каждого перехода существует направление поляризации, при котором поглощение отсутствует. На классическом языке это означает компенсацию работы внешнего поля, совершаемой над электроном в разных участках спирали.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 99-02-17127) и программой «Физика твердотельных наноструктур» Министерства науки.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Ya. Prinz, V. A. Seleznev, V. A. Samoylov, and A. K. Gutakovsky, *Microelectronic Engineering* **30**, 439 (1996).
2. V. Ya. Prinz, V. A. Seleznev, A. K. Gutakovsky, *24th Intern. Conf. on Semiconductor Physics*, Jerusalem, Israel (1998), Abstracts.