

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИВОЛИНЕЙНОЙ КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКЕ

*Л. И. Магарилл**, *М. В. Энтин***

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

Поступила в редакцию 28 октября 2002 г.

Исследуется адиабатическое движение электронов по криволинейной квантовой проволоке. Предполагается, что поперечное сечение проволоки постоянно по ее длине. Потенциал, ограничивающий движение электронов поперек проволоки, и форма ее поперечного сечения считаются произвольными. Кривизна и внутреннее кручение (производная от угла поворота сечения проволоки по длине) предполагаются малыми. Получен эффективный нерелятивистский адиабатический гамильтониан для движения электронов вдоль проволоки с сохранением поперечных квантовых чисел. Найден гамильтониан спин-орбитального взаимодействия, связанного с кривизной и кручением проволоки. Изучены частные случаи прямолинейной скрученной квантовой проволоки с некруговым поперечным сечением и криволинейной квантовой проволоки на плоскости. Рассмотрены различные модели поперечного потенциала, ограничивающего движение электронов. В частности, найдены коэффициенты эффективного гамильтониана для квантовых проволок прямоугольного и кругового сечений с жесткими стенками, а также проволок с параболическим потенциалом.

PACS: 71.70.Ej, 73.63.Fg, 73.63.Hs

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время быстрый технологический прогресс позволил создать различные низкоразмерные системы сложной геометрической формы [1–4], такие как свитки, кольца, спирали и другие структуры. Электронные состояния в искривленных низкоразмерных системах изучались как теоретически, так и экспериментально (см., например, [5–10]). Известно, что кривизна системы вызывает появление эффективного геометрического потенциала [11–13], который дополняет большие энергетические уровни поперечного квантования. В системах с асимметричным потенциалом, ограничивающим поперечное движение, в дополнение к геометрическому потенциалу возникают поправки к продольной кинетической энергии, обратно пропорциональные толщине слоя [14].

В физических одномерных системах в отличие от математических линий необходимо учитывать поперечную геометрию. Поэтому одномерные систе-

мы характеризуются, помимо кривизны, еще и формой поперечного сечения. Локальный одномерный гамильтониан системы должен определяться как локальной кривизной системы, так и закрученностью проволоки вдоль ее оси. Частный случай прямой закрученной проволоки рассмотрен в работе авторов [15].

Целью настоящей работы является получение эффективного гамильтониана для электронов в искривленной и, возможно, закрученной квантовой проволоке. Будут рассматриваться квантовые проволоки постоянного сечения как круговой, так и некруговой симметрии. Мы построим адиабатический гамильтониан для движения электронов вдоль проволоки. Затем будут рассмотрены некоторые частные случаи.

Вначале будет получен гамильтониан без учета электронного спина. Далее мы построим дополнительное слагаемое, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием.

На рис. 1, 2 изображены различные квантовые проволоки, к которым относится постановка нашей задачи. Некоторые из них являются частными случаями квантовых проволок, полученных в [1].

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

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

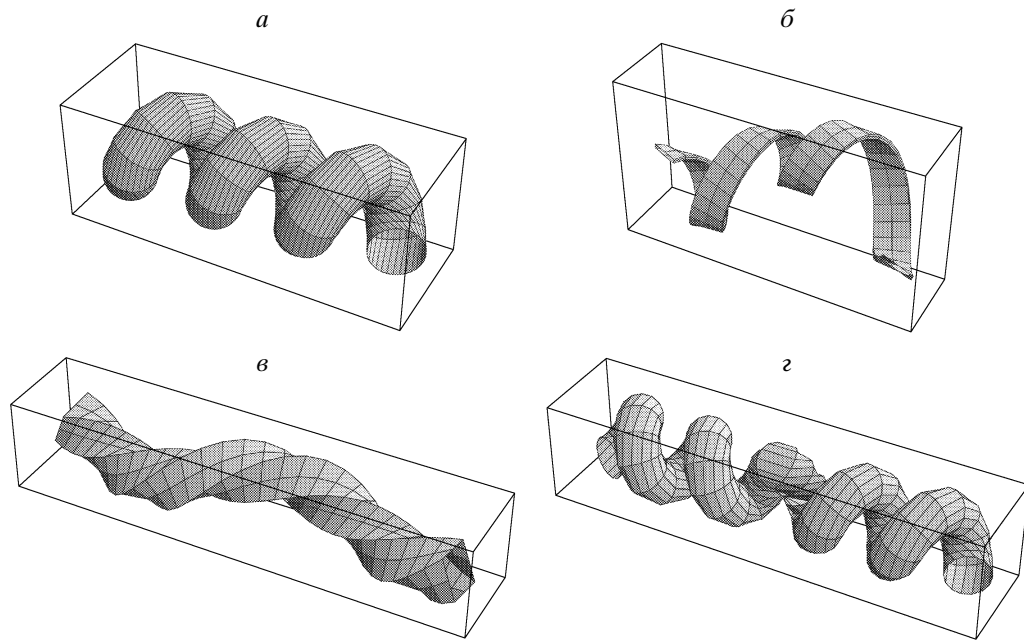


Рис. 1. Примеры искривленных квантовых проволок с постоянным сечением: *a* — спираль с постоянным шагом из проволоки круглого сечения, *б* — искривленная тонкая полоска без внутреннего кручения, *в* — закрученная искривленная проволока с квадратным сечением, *г* — сопряжение левой и правой спиралей круглого сечения

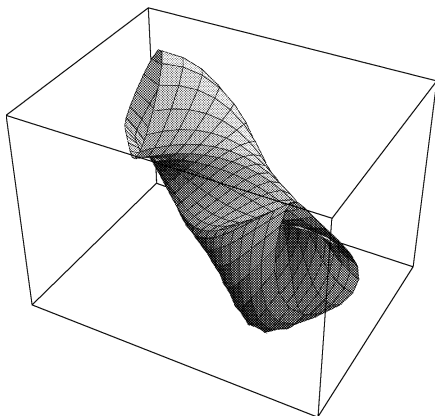


Рис. 2. Отрезок искривленной и закрученной проволоки асимметричного сечения

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается движение электронов с квадратичным и изотропным спектром в изогнутой и/или скрученной квантовой проволоке. В пренебрежении толщиной проволока задается уравнением

$$\mathbf{r} = \mathbf{a}(q_3). \quad (1)$$

В качестве q_3 выбрана длина дуги вдоль кривой $\mathbf{a}(q_3)$. Однако для учета формы проволоки такого одномерного описания мало. Если учитывать конечность толщины, уравнение (1) определяет только некоторую среднюю линию, проходящую внутри проволоки вдоль нее.

Рассматриваемую систему можно представить как однородную прямолинейную проволоку с поперечным сечением произвольной формы, которую закрутили вдоль оси и/или изогнули (см. рис. 2). Будем считать изгиб и кручение проволоки произвольным образом зависящим от q_3 . Математически проволоку можно задать как геометрическое место точек, образованное плоской фигурой при ее движении вдоль кривой, причем, во-первых, ее плоскость остается нормальной к кривой в точках их пересечения и, во-вторых, кривая пересекает фигуру в одной и той же точке фигуры.

В общем случае мы будем ограничивать движение электронов поперек проволоки произвольным, не обязательно жестким, потенциалом $U(\mathbf{r})$. Потенциал, отвечающий нашим предположениям, должен одинаково зависеть от поперечных по отношению к кривой локальных координат в любом сечении с точностью до поворота системы координат вокруг касательной к кривой. Выберем такую систему коор-

динат (криволинейных), чтобы в ней потенциал не зависел от q_3 . Введем подвижный репер кривой из касательной $\mathbf{t}(q_3) = \partial_3 \mathbf{a}$, нормали $\mathbf{n}(q_3) = \partial_3 \mathbf{t} / |\partial_3 \mathbf{t}|$ и бинормали $\mathbf{b}(q_3) = \mathbf{t} \times \mathbf{n}$, а также связанные с ним векторы

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{n} \cos \phi - \mathbf{b} \sin \phi, \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{n} \sin \phi + \mathbf{b} \cos \phi. \quad (2)$$

Здесь $\phi(q_3)$ — угол поворота поперечного сечения вокруг \mathbf{t} . Определим новые координаты соотношением

$$\mathbf{r}(\mathbf{q}) = \mathbf{a}(q_3) + q_1 \mathbf{n}_1 + q_2 \mathbf{n}_2. \quad (3)$$

В координатах q_i поперечный потенциал имеет вид $U = U(\mathbf{q}_\perp)$, где $\mathbf{q}_\perp = (q_1, q_2)$.

Будем считать толщину проволоки малой по сравнению с радиусом ее кривизны. Кроме того, будет полагаться малым произведение внутреннего кручения $\omega \equiv \partial_3 \phi$ проволоки на ее толщину. Эти параметры определяют адиабатичность движения электрона по проволоке: при продольном движении электроны сохраняют номер подзоны поперечного квантования. Схема получения эффективного гамильтониана заключается в следующем: исходный гамильтониан раскладывается в ряд по степеням толщины, а волновая функция ищется в виде разложения по поперечным адиабатическим состояниям. Результатом является одномерный гамильтониан для движения по определенной подзоне поперечного квантования.

3. ЭФФЕКТИВНЫЙ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЙ ГАМИЛЬТониАН

Уравнение Шредингера в новых координатах имеет вид

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_{i,j} \partial_i \left(\sqrt{G} G^{ij} \partial_j \right) + U(q_1, q_2) \right] \Psi = E \Psi. \quad (4)$$

Здесь G^{ij} — контравариантный метрический тензор, обратный ковариантному метрическому тензору $G_{ij} = \partial_i \mathbf{r} \cdot \partial_j \mathbf{r}$; $G = \det G_{ij}$.

Из выражений (3) и (2) для производных $\partial_i \mathbf{r}$ получаем

$$\partial_3 \mathbf{r} = \mathbf{t}(1 - \kappa(\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{l})) + (\tau - \omega)([\mathbf{q}_\perp \times \mathbf{l}]_3 \times \mathbf{n} + (\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{l})\mathbf{b}), \quad (5)$$

$$\partial_{1,2} \mathbf{r} = \mathbf{n}_{1,2}. \quad (6)$$

В (5) введены обозначения $\mathbf{l} = (\cos \phi, \sin \phi)$; $\kappa = |\partial_3 \mathbf{t}|$ — кривизна кривой, $\tau(q_3) = (\mathbf{t} \cdot \partial_3 \mathbf{t} \times \partial_3^2 \mathbf{t}) / \kappa^2$ — геометрическое кручение кривой. При получении этого выражения были использованы формулы Френе–Серре: $\partial_3 \mathbf{n} = -\kappa \mathbf{t} + \tau \mathbf{b}$, $\partial_3 \mathbf{b} = -\tau \mathbf{n}$.

Используя (5) и (6), находим

$$G_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -q_2 \zeta \\ 0 & 1 & q_1 \zeta \\ -q_2 \zeta & q_1 \zeta & G + \zeta^2 q_\perp^2 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$G^{ij} = \frac{1}{G} \begin{pmatrix} G + \zeta^2 q_2^2 & -\zeta^2 q_1 q_2 & \zeta q_2 \\ -\zeta^2 q_1 q_2 & G + \zeta^2 q_1^2 & -\zeta q_1 \\ \zeta q_2 & -\zeta q_1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$G = (1 - \kappa(\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{l}))^2 \equiv (1 - Q)^2, \quad (9)$$

где $\zeta = \tau - \omega$. Волновую функцию следует нормировать условием

$$\int |\Psi|^2 \sqrt{G} d^3 q = 1.$$

Чтобы исключить \sqrt{G} из элемента объема в нормировке волновой функции, введем новую функцию $\Phi = \Psi G^{-1/4}$. Поскольку мы интересуемся пределом малой толщины d проволоки, будем разлагать коэффициенты уравнения Шредингера по величинам ζq_\perp и Q . При этом будем иметь в виду, что $q_\perp \sim d$, а $\partial_{1,2}$ при действии на поперечные волновые функции имеет порядок $1/d$.

После подстановки уравнение Шредингера принимает вид

$$\left[\mathbf{p}_\perp^2 + (p_3 - \zeta M)^2 - \frac{\kappa^2}{4} \right] \Phi = 2\mu(E - U)\Phi, \quad (10)$$

где $p_j = -i\partial_j$, $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_\perp, p_3)$, $M = q_1 p_2 - q_2 p_1$ — оператор проекции момента на третью ось.

Проведем разложение волновой функции Φ по поперечным состояниям $\psi_n(\mathbf{q}_\perp)$ в проволоке:

$$\Phi(\mathbf{q}) = \sum_n \psi_n(\mathbf{q}_\perp) \chi_n(q_3), \quad (11)$$

причем состояния удовлетворяют уравнению

$$\left(\frac{\mathbf{p}_\perp^2}{2\mu} + U \right) \psi_n = E_n \psi_n, \quad (12)$$

где E_n — энергия поперечного состояния в проволоке. В результате для продольной части волновой функции $\chi_n(q_3)$ получаем систему уравнений

$$\left[\frac{p^2}{2\mu} + E_n - \frac{\kappa^2}{8\mu} \right] \chi_n + \frac{1}{2\mu} \sum_{n'} \left[\zeta^2 (M^2)_{nn'} - 2\{\zeta, p\}(M)_{nn'} + 2\{\kappa \mathbf{l}, p^2\}(\mathbf{q}_\perp)_{nn'} \right] \chi_{n'} = E \chi_n. \quad (13)$$

Здесь и далее фигурные скобки обозначают операцию симметризации операторов:

$$\{A, B\} = \frac{1}{2}(AB + BA),$$

в одномерных уравнениях будем опускать индекс «3» у координаты и импульса. В выражении (13) коммутаторы величин ζ , κ и \mathbf{l} с продольным импульсом p малы, тем не менее пренебрегать их некоммутативностью нельзя, чтобы сохранить эрмитовость гамильтониана.

Рассмотрим вначале невырожденный спектр поперечных состояний. Будем искать состояния, формирующиеся из некоторого поперечного состояния n , считая все остальные $\chi_{n'}$ при $n' \neq n$ малыми по сравнению с χ_n . В соответствии с этим предположением в уравнении (13) оставим только диагональное слагаемое. Диагональный матричный элемент $(M)_{nn}$ обращается в нуль, и уравнение (13) упрощается:

$$h_n \chi_n \equiv \left[\frac{p^2}{2\mu} - \overbrace{\frac{\kappa^2(q)}{8\mu}}^a + \overbrace{\frac{1}{2\mu} \beta_n \zeta^2(q)}^b + \overbrace{\frac{1}{\mu} \{\kappa \mathbf{l}, p^2\}(\mathbf{q}_\perp)_{nn}}^c \right] \chi_n = (E - E_n) \chi_n. \quad (14)$$

Здесь $\beta_n = (M^2)_{nn}$. Дополнительным критерием справедливости использованного приближения является достаточная малость недиагональных слагаемых $\{\zeta, p\}(M)_{nn'}$. Как видно из дальнейшего, это условие справедливо при $pd \ll 1$, т. е. вблизи доньев подзон поперечного квантования, но нарушается при увеличении продольной энергии электрона.

Слагаемое a в уравнении (14) представляет известный [11] геометрический потенциал, обусловленный исключительно кривизной проволоки и не зависящий от ее внутренней структуры.

Слагаемое b определяется внутренним и геометрическим кручением проволоки. Через матричный

элемент $(M^2)_{nn}$ это слагаемое зависит от вида поперечного потенциала и поперечных волновых функций. Величина $(M^2)_{nn}$ имеет порядок единицы, если поперечное сечение проволоки не является ни слишком вытянутым, ни слишком симметричным. Это слагаемое имеет положительный знак (частица отталкивается от области с большим $|\zeta|$) в отличие от геометрического потенциала, притягивающего частицу к области с максимальной кривизной. Слагаемое b исчезает, если внутреннее и геометрическое кручения равны. Кроме того, оно обращается в нуль для проволоки с круговым сечением для всех невырожденных состояний (с нулевой проекцией момента на ось), в частности, в случае основного состояния.

Слагаемое c в уравнении (14) содержит диагональный матричный элемент от поперечной координаты $(\mathbf{q}_\perp)_{nn}$. Если интересуют состояния только в одной (например, нижней) подзоне поперечного квантования, то $(\mathbf{q}_\perp)_{nn}$ можно обратить в нуль выбором начала координат для \mathbf{q}_\perp . Для потенциалов $U(\mathbf{q}_\perp)$, симметричных по отношению к поворотам относительно оси 3 на углы $2\pi/N$, $N = 2, 3, \dots$ (в том числе аксиально-симметричных), матричные элементы $(\mathbf{q}_\perp)_{nn} = 0$ для всех n . В частности, такой симметрией обладают параболические потенциалы, а также квантовые проволоки прямоугольного сечения с жесткими стенками.

В более общем случае квантовой проволоки с несимметричным потенциалом слагаемое c остается. Оно имеет центробежное происхождение: электрон, путешествующий по криволинейной проволоке, прижимается центробежной силой к внешней стороне изогнутой проволоки, тем самым меняя и свою потенциальную энергию в несимметричном потенциале ямы. Аналогичное слагаемое мы получили для случая движения по криволинейной поверхности [14].

Этот вклад, зависящий от продольного импульса электрона, является малой добавкой к кинетической энергии. Однако слагаемое c существенно, если продольная энергия электрона становится достаточно велика. Сравнение членов a и c показывает, что c превышает a при условии $p^2 \geq \kappa/d$. При малой энергии главным вкладом становится геометрический потенциал. Отметим, что слагаемое c делает эффективный гамильтониан зависящим от угла ϕ , т. е. от ориентации поперечного сечения относительно нормали к кривой.

Отметим, что наш результат отличается от полученного в работах [11–13] тем, что эффективный потенциал, помимо геометрического слагаемого, опре-

деляемого кривизной, содержит слагаемые b и c , зависящие от кручения проволоки. В общем случае этими вкладами пренебрегать нельзя. Только в случае проволоки кругового сечения результат может быть сведен к геометрическому потенциалу (см. ниже). Причина ошибки состоит в необоснованном пренебрежении внутренней структурой квантовой проволоки при переходе к пределу бесконечно тонкой проволоки. Слагаемые b и c , будучи зависимыми от поперечных волновых функций, приводят к неоднозначности эффективного гамильтониана в пределе бесконечно тонкой проволоки. (Впрочем, отсутствие предела следует уже из расходимости энергии поперечных состояний.)

При достаточно большой продольной энергии необходимо учитывать линейные по p слагаемые в уравнении (13). Формально эти слагаемые имеют самый большой порядок величины из всех членов, обусловленных кривизной и кручением проволоки. Однако, поскольку диагональные элементы от этого возмущения обращаются в нуль, эффективное одноподзонное уравнение Шредингера нужно строить во втором порядке теории возмущений.

Запишем основные члены в уравнении (13) в виде

$$(h_n + E_n - E)\chi_n = \sum_{n'} \frac{1}{\mu} \{\zeta, p\} (M)_{nn'} \chi_{n'}. \quad (15)$$

Выразим малые компоненты $\chi_{n'}$ ($n' \neq n$) через χ_n и подставим в уравнение для χ_n , после чего оборвем итерации:

$$\left[h_n - \frac{1}{\mu^2} \sum_{n'} \{\zeta, p\} \frac{|(M)_{nn'}|^2}{h_{n'} + E_{n'} - E} \{\zeta, p\} \right] \chi_n = (E - E_n)\chi_n. \quad (16)$$

Функция $\zeta(q)$ является плавной функцией координат, поэтому действие операторов h_n и $\{\zeta, p\}$ на волновую функцию приводит к малому изменению продольного импульса. В результате знаменатель в (16) можно заменить на $E_n - E_{n'}$, и мы находим

$$H_n = \frac{1}{2\mu} \left[p^2 - \frac{1}{4} \kappa^2 + \beta_n \zeta^2 - \overbrace{\gamma_n \{\zeta, p\}^2}^d + 2(\mathbf{q}_\perp)_{nn} \{\kappa \mathbf{l}, p^2\} \right], \quad (17)$$

$$H_n \chi_n = (E - E_n) \chi_n, \quad (18)$$

где

$$\gamma_n = \frac{2}{\mu} \sum_{n' \neq n} \frac{|(M)_{nn'}|^2}{E_{n'} - E_n}. \quad (19)$$

Константы β_n и γ_n полностью определяются поперечным потенциалом. Безразмерная величина β_n в общем случае имеет порядок 1, а размерная константа γ_n имеет порядок квадрата толщины проволоки. Слагаемое с γ_n дает поправку к кинетической энергии, малую по параметру $\zeta^2 \gamma_n \sim (\zeta d)^2 \ll 1$. Соотношение этого слагаемого и вклада, пропорционального β_n , определяется отношением продольной энергии электрона $p^2/2\mu$ к расстоянию между поперечными уровнями.

В частном случае квантовой проволоки с симметричным потенциалом эффективный гамильтониан можно написать в виде

$$H_n = \frac{1}{2\mu} \left[p^2 - \frac{1}{4} \kappa^2 + \beta_n \zeta^2 - \gamma_n \{\zeta, p\}^2 \right]. \quad (20)$$

Если кривизна и кручение ζ постоянны, то они приводят к сдвигу дна подзон на величину $(4\beta_n \zeta^2 - \kappa^2)/8\mu$ и к изменению эффективной массы электрона $1/\mu \rightarrow 1/\mu (1 - \gamma_n \zeta^2)$. Знак сдвига доньев подзон определяется соотношением между величинами кривизны и кручения.

Другой частный случай представляет прямолинейная проволока с кручением. В такой проволоке $\kappa = \tau = 0$. Ограничиваясь состояниями вблизи дна зоны, из (20) получаем одномерное уравнение Шредингера с эффективным потенциалом $\beta_n \omega^2/2\mu$:

$$\left[p^2 + \beta_n \omega^2 \right] \chi_n = 2\mu(E - E_n)\chi_n. \quad (21)$$

Этот результат получен нами ранее в работе [15].

Выведенный эффективный гамильтониан позволяет свести задачу о движении электрона в квантовой проволоке к решению чисто одномерного уравнения Шредингера с переменными коэффициентами. Известные точно решаемые одномерные задачи могут быть применены для рассмотрения специальных типов изогнутых и/или закрученных квантовых проволок.

4. КОНСТАНТЫ β_n И γ_n ДЛЯ КОНКРЕТНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ КВАНТОВОЙ ПРОВОЛОКИ

Вычислим величины β_n и γ_n для типичных потенциалов $U(\mathbf{q}_\perp)$. Вначале рассмотрим потенциал типа прямоугольного ящика $-a_i/2 < q_i < a_i/2$ с твердыми стенками. Поперечные состояния $n = (n_1, n_2)$ характеризуются двумя числами $n_{1,2} = 1, 2, \dots$, при этом

$$E_n = \frac{\pi^2}{2\mu} \left(\frac{n_1^2}{a_1^2} + \frac{n_2^2}{a_2^2} \right).$$

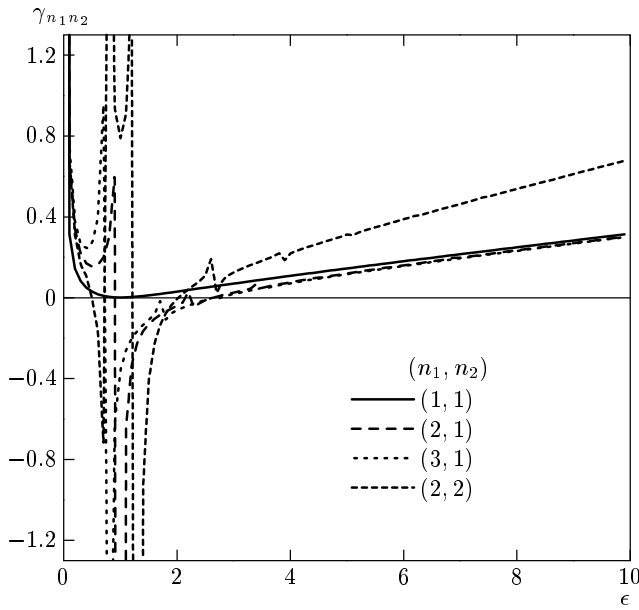


Рис. 3. Зависимость γ_n/ab от ϵ для разных n

Для коэффициентов β_n и γ_n находим

$$\beta_n = \frac{1}{12} \left[\pi^2 \left((\epsilon n_1)^2 + \left(\frac{n_2}{\epsilon} \right)^2 \right) - 6 \left(\left(\frac{\epsilon n_1}{n_2} \right)^2 + \left(\frac{n_2}{\epsilon n_1} \right)^2 \right) \right], \quad (22)$$

$$\gamma_n = \frac{2^{12} ab}{\pi^6 \epsilon} \sum_{n' \neq n} C(n_1, n'_1) C(n_2, n'_2) \times \frac{n_1^2 n_2^2 n_1'^2 n_2'^2}{(n_1^2 - n_1'^2)^4 (n_2^2 - n_2'^2)^4} \times \frac{(n_2^2 - n_2'^2 - \epsilon^2 (n_1^2 - n_1'^2))^2}{\epsilon^2 (n_1'^2 - n_1^2) + n_2'^2 - n_2^2}, \quad (23)$$

где $\epsilon = a_2/a_1$ — отношение сторон прямоугольника,

$$C(n_1, n'_1) = \frac{1 - (-1)^{(n_1+n'_1)}}{2}.$$

На рис. 3 изображена зависимость $\gamma_{n_1 n_2}/a_1 a_2$ от параметра ϵ . Величина $\gamma_{n_1 n_2}(\epsilon)$ обладает очевидной симметрией, $\gamma_{n_1 n_2}(\epsilon) = \gamma_{n_2 n_1}(1/\epsilon)$. Для основного состояния $n = (1, 1)$ зависимость $\gamma_{n_1 n_2}(\epsilon)$ не имеет особенностей. Резонансы для более высоких уровней соответствуют условиям возникновения вырожденных состояний:

$$\epsilon^2 (n_1^2 - n_1'^2) + n_2^2 - n_2'^2 = 0.$$

Другой пример — параболический удерживающий потенциал вида

$$U(\mathbf{q}_\perp) = \frac{\mu(\omega_1^2 q_1^2 + \omega_2^2 q_2^2)}{2}.$$

Теперь

$$E_n = \omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right), \quad n_{1,2} = 0, 1, 2, \dots$$

Для величин β_n, γ_n находим

$$\beta_n = \frac{1}{4\omega_1\omega_2} \times [(2n_1 + 1)(2n_2 + 1)(\omega_1^2 + \omega_2^2) - 2\omega_1\omega_2], \quad (24)$$

$$\gamma_n = \frac{1}{2\mu\omega_1\omega_2} \times \left[(\omega_1 - \omega_2)^2 \frac{n_1 + n_2 + 1}{\omega_1 + \omega_2} + (\omega_1 + \omega_2)^2 \frac{n_2 - n_1}{\omega_1 - \omega_2} \right]. \quad (25)$$

Применимость (23), (25) ограничивается близостью знаменателей к нулю.

5. ВЫРОЖДЕННЫЙ СПЕКТР

В случае, если спектр поперечных состояний вырожден, теория возмущений неприменима из-за обращения в нуль энергетических знаменателей. В то же время матричные элементы от проекции момента M и q_\perp между разными состояниями, принадлежащими этой группе, вообще говоря, в нуль не обращаются. Вырожденный спектр возникает, например, в частных случаях квантовой проволоки с квадратным сечением или в параболическом потенциале с кратными частотами.

В вырожденном случае в качестве эффективного уравнения Шредингера можно рассматривать уравнение (13), в котором оставлены только слагаемые, принадлежащие вырожденной группе.

Частным случаем вырождения является аксиальная симметрия потенциала: $U(\mathbf{q}_\perp) = U(q_\perp)$. Из-за симметрии в этом случае выбор угла $\phi(q)$ является произвольным. В частности, можно положить ϕ равным нулю. Очевидно, что наблюдаемые величины не должны зависеть от выбора ϕ . Состояния поперечного движения ψ_{nm} классифицируются по значениям проекции момента m . Все состояния, кроме состояний с проекцией момента, равной нулю, двукратно вырождены по знаку проекции момента. Матричный элемент от \mathbf{q}_\perp обращается в нуль, после

чего для состояний с заданной проекцией момента уравнение Шредингера диагоналізується:

$$\left[\frac{(p - m\zeta)^2}{2\mu} - \frac{\kappa^2}{8\mu} \right] \chi_m = (E - E_n) \chi_m. \quad (26)$$

Величина $m\zeta$ играет роль вектора-потенциала. Кручение можно исключить из этого уравнения, перейдя к новой волновой функции $u(q)$:

$$\chi_m = \exp\left(im \int \zeta dq \right) u(q),$$

$$\left[\frac{p^2}{2\mu} - \frac{\kappa^2}{8\mu} \right] u = (E - E_n) u.$$

Возможность исключения кручения из уравнения (26) непосредственно связана с произволом в выборе угла ϕ . Действительно, геометрическое кручение входит в уравнение аддитивно с внутренним кручением, и если отсутствует зависимость физических величин от ϕ , то не должно быть зависимости и от τ . Таким образом, для проволоки круглого сечения эффективное уравнение Шредингера сводится к введению геометрического потенциала. Однако при выборе координатной системы вдоль геометрических направляющих \mathbf{n} , \mathbf{b} волновая функция приобретает дополнительную фазу (фазу Берри [16]), кратную углу поворота геометрических направляющих. Дело в том, что изогнутая квантовая проволока кругового сечения обладает, тем не менее, анизотропией, навязываемой нормалью к кривой. Вращение нормали по ходу проволоки эквивалентно повороту направляющих проволоки, определяющему фазу Берри.

6. ПЛОСКАЯ КВАНТОВАЯ ПРОВОЛОКА

Чаще всего изучались квантовые проволоки, сформированные на плоской поверхности. Такие проволоки описываются плоскими кривыми и одной из направляющих их поперечного сечения является нормаль к поверхности. Это значит, что как τ , так и ω обращаются в нуль и в гамильтониане (20) остается только геометрический потенциал:

$$H_n = \frac{1}{2\mu} \left[p^2 - \frac{1}{4} \kappa^2 \right]. \quad (27)$$

Рассмотрим в качестве примера плоскую кривую в форме змейки $y = a \sin(bx)$. Кривизна кривой в точке x есть

$$\kappa = - \frac{ab^2 \sin(bx)}{[1 + a^2 b^2 \cos^2(bx)]^{3/2}}.$$

Возвращаясь от q к декартовой переменной x , получаем уравнение Шредингера в виде

$$\frac{1}{\sqrt{1 + a^2 b^2 \cos^2(bx)}} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{1 + a^2 b^2 \cos^2(bx)}} \frac{\partial}{\partial x} \chi + \frac{a^2 b^4 \sin^2(bx)}{4[1 + a^2 b^2 \cos^2(bx)]^3} \chi = 2\mu(E_n - E) \chi. \quad (28)$$

Считая змейку полой ($ab \ll 1$), в главном порядке получаем уравнение Матье

$$\chi'' + \left[2\mu(E - E_n) + \frac{a^2 b^4}{2} (1 - \cos(2bx)) \right] \chi = 0. \quad (29)$$

7. СПИРАЛЬНАЯ КВАНТОВАЯ ПРОВОЛОКА

В этом разделе мы рассмотрим квантовую проволоку, имеющую форму спирали с постоянным шагом D , навитой на поверхность цилиндра. Функция $\mathbf{a}(q_3)$ для такой спирали имеет вид

$$\mathbf{a}(q_3) = \left(R \cos \frac{2\pi q_3}{S}, R \sin \frac{2\pi q_3}{S}, \frac{D q_3}{S} \right), \quad (30)$$

где $S = \sqrt{(2\pi R)^2 + D^2}$. Используя (30), нетрудно получить выражения для кривизны и геометрического кручения:

$$\kappa = R \left(\frac{2\pi}{S} \right)^2, \quad \tau = \frac{2\pi D}{S^2}. \quad (31)$$

В невырожденном случае в отсутствие внутреннего кручения ($\omega = 0$) получаем гамильтониан

$$H_n = \frac{1}{2\mu} p^2 \left[1 + 2|(\mathbf{q}_\perp)_{nn}| \kappa - \gamma_n \tau^2 \right] + \frac{1}{2\mu} \left[\beta_n \tau^2 - \frac{1}{4} \kappa^2 \right]. \quad (32)$$

Гамильтониан (32) не зависит от координат, сохраняет продольный импульс и сразу дает энергетический спектр. Множитель при p^2 определяет перенормированную эффективную массу, причем поправки оказываются малыми по адиабатическим параметрам. Если поперечный потенциал проволоки обладает указанной ранее симметрией, то слагаемое $|(\mathbf{q}_\perp)_{nn}|$ исчезает. Второе слагаемое в правой части формулы (32), равное

$$\frac{1}{2\mu R^2} \frac{\beta_n (D/2\pi R)^2 - 1}{(1 + (D/2\pi R)^2)^2},$$

представляет собой сдвиг дна подзон, обусловленный кривизной и кручением. Этот сдвиг может быть как положительным, так и отрицательным и зависит от номера подзоны.

8. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Исходный гамильтониан спин-орбитального взаимодействия для зоны проводимости имеет вид

$$\mathcal{H}^{SO} = -i\alpha[\boldsymbol{\sigma} \times \nabla U]\nabla. \quad (33)$$

Здесь α — эффективная константа спин-орбитального взаимодействия в объемном кристалле. В полупроводниках типа A_3B_5 для долины Γ_1

$$\alpha = (2E_g m)^{-1} \frac{\Delta(2E_g + \Delta)}{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)}$$

(см., например, [17]), где E_g — ширина запрещенной зоны, Δ — спин-орбитальное расщепление валентной зоны.

Далее будет рассмотрен только случай невырожденных поперечных состояний. Преобразуем гамильтониан (33), перейдя к ранее введенной криволинейной системе координат. После этого усреднение по поперечным состояниям определит эффективный гамильтониан спин-орбитального взаимодействия.

После преобразования гамильтониан (33) приобретает в пространстве функций Φ вид

$$\mathcal{H}^{SO} = \alpha \epsilon^{ijk} \frac{1}{G^{1/4}} \bar{\sigma}_j (\partial_k U) p_i \frac{1}{G^{1/4}}. \quad (34)$$

Здесь ковариантно-преобразованные матрицы Паули определяются соотношениями

$$\bar{\sigma}_j = K_{ji} \sigma_i, \quad K_{ji} = \partial_j r_i. \quad (35)$$

С помощью (5), (6) получаем

$$\bar{\sigma}_j = \tilde{\sigma}_j + \zeta \delta_{j3} (q_1 \tilde{\sigma}_2 - q_2 \tilde{\sigma}_1), \quad \tilde{\sigma}_j = (n_j)_i \sigma_i. \quad (36)$$

Здесь для удобства введен вектор $\mathbf{n}_3 \equiv \mathbf{t}$. Повернутые матрицы Паули $\tilde{\sigma}_j$ являются функциями только продольной координаты q_3 .

После разложения по степеням $q_{1,2}$ и усреднения по поперечным состояниям с номером n в главном порядке получаем эффективный гамильтониан спин-орбитального взаимодействия:

$$\begin{aligned} H_n^{SO} = & \alpha \left[\zeta (A_1 \tilde{\sigma}_1 + A_2 \tilde{\sigma}_2) + \kappa \tilde{\sigma}_3 (l_1 A_2 - l_2 A_1) + \right. \\ & \left. + \left\{ \kappa \left[\tilde{\sigma}_1 (l_1 A_{12} + l_2 A_{22}) - \tilde{\sigma}_2 (l_1 A_{11} + l_2 A_{21}) \right], p \right\} \right]. \quad (37) \end{aligned}$$

Величины A_i , A_{ij} определяются средними $\langle (\dots)_n = (\dots)_{nn} \rangle$ по поперечным волновым функциям:

$$\begin{aligned} A_1 = & i \left\langle q_2 ((\partial_1 U) \partial_2 - (\partial_2 U) \partial_1) \right\rangle_n, \\ A_2 = & -i \left\langle q_1 ((\partial_1 U) \partial_2 - (\partial_2 U) \partial_1) \right\rangle_n, \end{aligned} \quad (38)$$

$$A_{ij} = \left\langle q_i \partial_j U \right\rangle_n, \quad (39)$$

Величины A_i можно представить в другой форме, не содержащей явно потенциал U :

$$A_1 = -\frac{i}{2\mu} \langle \partial_2^2 \partial_1 \rangle_n, \quad A_2 = -\frac{i}{2\mu} \langle \partial_1^2 \partial_2 \rangle_n, \quad (40)$$

$$A_{11} = \frac{1}{2\mu} \langle (1 + 2q_1 \partial_1) (\partial_1^2 + \partial_2^2) \rangle_n, \quad (41)$$

$$A_{22} = \frac{1}{2\mu} \langle (1 + 2q_2 \partial_2) (\partial_1^2 + \partial_2^2) \rangle_n,$$

$$A_{12} = A_{21} = -\frac{1}{\mu} \langle q_1 \partial_2 (\partial_1^2 + \partial_2^2) \rangle_n. \quad (42)$$

Из последних выражений ясен порядок величины величин \mathbf{A} и A_{ij} . В общем случае $A_i \sim E_n^{3/2} \mu^{1/2}$, $A_{ij} \sim E_n$.

Выпишем еще один вид выражения (37) через проекции матриц Паули $\sigma_{\mathbf{t}}$, $\sigma_{\mathbf{n}}$, $\sigma_{\mathbf{b}}$ на орты базиса $(\mathbf{t}, \mathbf{n}, \mathbf{b})$:

$$\begin{aligned} H_n^{SO} = & \alpha \left[\zeta (\mathbf{A} \cdot \mathbf{l} \sigma_{\mathbf{n}} - [\mathbf{A} \times \mathbf{l}]_3 \sigma_{\mathbf{b}}) - \kappa [\mathbf{A} \times \mathbf{l}]_3 \sigma_{\mathbf{t}} + \right. \\ & + \left\{ \kappa \left[((l_1^2 - l_2^2) A_{12} - l_1 l_2 (A_{11} - A_{22})) \sigma_{\mathbf{n}} - \right. \right. \\ & \left. \left. - (l_1^2 A_{11} + l_2^2 A_{22} - 2l_1 l_2 A_{12}) \sigma_{\mathbf{b}} \right], p \right\} \right]. \quad (43) \end{aligned}$$

Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия (37) содержит кручение только в комбинации с вектором \mathbf{A} . Вектор \mathbf{A} обращается в нуль, если в потенциале $U(\mathbf{q}_{\perp})$ переменные $q_{1,2}$ разделяются или если этот потенциал обладает центром инверсии. В этом случае спин-орбитальное взаимодействие определяется исключительно кривизной проволоки. Компонента тензора A_{12} обращается в нуль, если потенциал имеет плоскость симметрии $q_1 \leftrightarrow -q_1$ или $q_2 \leftrightarrow -q_2$. В этом случае гамильтониан спин-орбитального взаимодействия может быть записан в виде

$$\begin{aligned} H_n^{SO} = & -\frac{\alpha}{2} \left\{ \kappa (A_{11} + A_{22}) \sigma_{\mathbf{b}} + \right. \\ & \left. + \kappa (A_{11} - A_{22}) (\sigma_{\mathbf{n}} \sin 2\phi + \sigma_{\mathbf{b}} \cos 2\phi), p \right\}. \quad (44) \end{aligned}$$

В частности, для невырожденных подзон в аксиально-симметричном потенциале (в том числе, для самой низкой подзоны) гамильтониан (44) приобретает простой вид:

$$H_n^{SO} = -\alpha A_{11} \{ \kappa \sigma_{\mathbf{b}}, p \}. \quad (45)$$

9. СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЛЯ КОНКРЕТНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Вычислим величины A_i и A_{ij} для ранее упомянутых моделей проволоки с гармоническим потенциалом, ящика прямоугольного сечения с жесткими стенками и для невырожденных состояний в цилиндрической проволоке с жесткими стенками. В этих моделях $A_1 = A_2 = A_{12} = 0$.

Для гармонического потенциала величины A_{ii} легко вычисляются непосредственно и определяются выражением $A_{ii} = \omega_i(n_i + 1/2)$.

Для нахождения матричных элементов, содержащих производные от потенциала, в случае ямы с бесконечными стенками необходимо провести аккуратный предельный переход к бесконечному потенциалу, поскольку при $U \rightarrow \infty$ волновая функция стремится к нулю в области действия потенциала. Для этого можно воспользоваться следующим приемом.

Рассмотрим обобщенную задачу о квантовой проволоке произвольной формы с жесткими стенками. Пусть ее граница задается уравнением $f(\mathbf{q}_\perp) = 0$. Для определенности будем считать что $f(\mathbf{q}_\perp) < 0$ всюду внутри и $f(\mathbf{q}_\perp) > 0$ всюду снаружи проволоки. Выберем потенциал стенок в виде $U(\mathbf{q}_\perp) = U_0\theta(f(\mathbf{q}_\perp))$, где $U_0 \rightarrow \infty$. Нам необходимы матричные элементы вида $(f_1(\mathbf{q}_\perp)\partial U(\mathbf{q}_\perp))_{nn'}$, где $f_1(\mathbf{q}_\perp)$ — некоторая функция.

При больших, но конечных значениях U_0 волновая функция ведет себя как $\exp(-k\xi)$, где $k = \sqrt{2\mu U_0}$, ξ — кратчайшее расстояние до границы. Из непрерывности волновой функции и ее производных на границе следует, что $\partial_\xi \psi / \psi|_{\xi=0} = -k$. Когда $U_0 \rightarrow \infty$, $\psi(\xi = 0) \rightarrow 0$, в то время как величина $\partial_\xi \psi|_{\xi=0}$ остается конечной. Выражая волновую функцию через ее производную, находим

$$(f_1(\mathbf{q}_\perp)\partial U(\mathbf{q}_\perp))_{nn'} = -\frac{1}{2\mu}(\partial_\xi f_1(\mathbf{q}_\perp)(\partial f(\mathbf{q}_\perp))\delta(f(\mathbf{q}_\perp))\partial_\xi)_{nn'}. \quad (46)$$

Эту формулу можно рассматривать как замену возмущения $f_1(\mathbf{q}_\perp)\partial U(\mathbf{q}_\perp)$ на оператор

$$-\frac{1}{2\mu}(\mathbf{N} \cdot \partial)f_1(\partial f)\delta(f)(\mathbf{N} \cdot \partial),$$

где $\mathbf{N}(\mathbf{q}_\perp) = \partial f / |\partial f|$ — нормаль к границе. Новая форма возмущения не зависит от величины потенциала на границе.

С помощью этого приема мы можем вычислить и величины A_i и A_{ij} , согласно выражению (37). В результате для квантовой проволоки прямоугольного

сечения с жесткими стенками получим диагональные элементы вида

$$A_{ii} = \frac{\pi^2 n_i^2}{\mu a_i^2}. \quad (47)$$

В случае цилиндрической проволоки радиуса R с жесткими стенками волновые функции поперечного движения с $m = 0$ невырождены и даются функциями Бесселя $\psi_n(r) = C J_0(\lambda_n r/R)$, где $r = |\mathbf{q}_\perp|$, λ_n — нули функции Бесселя нулевого порядка, $E_n = \lambda_n^2/2\mu R^2$. Из-за симметрии $A_{11} = A_{22}$. Применяя (39), а затем (46), находим

$$A_{11} \equiv \frac{1}{2}(A_{11} + A_{22}) \equiv \frac{1}{2}\langle r(\partial_r U) \rangle_n \equiv \frac{1}{4\mu}R^2(\psi'_n(R))^2 = E_n. \quad (48)$$

В заключение отметим, что в данной работе мы вывели адиабатические эффективные гамильтонианы для движения электронов в изогнутой и скрученной квантовых проволоках. Был рассмотрен общий случай неплюской квантовой проволоки с постоянным сечением, не обязательно круговым. Задача решена для квадратичного простого изотропного энергетического спектра электронов, в отсутствие и при наличии вырождения поперечных состояний. При выводе гамильтониана мы не ограничивались состояниями вблизи доньев подзон поперечного квантования. Рассмотрение проводилось с учетом спин-орбитального взаимодействия. Рассмотрены различные примеры искривленных и скрученных проволок с различным поперечным потенциалом.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № № 02-02-16377, 00-02-17658).

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Ya. Prinz, V. A. Seleznev, and A. K. Gutakovsky, in *Proc. 24th Int Conf. on Physics of Semiconductors*, ed. by D. Gershoni, World Sci., Singapore (1999); V. Ya. Prinz, V. A. Seleznev et al., *Physica E* **6**, 828 (2000).
2. V. Ya. Prinz et al., *Inst. Phys. Conf. Ser.* 166, Bristol, IOP Publ. (2000), p. 203.
3. V. Ya. Prinz, D. Grutzmacher et al., *Nanotechnology* **12**, S1 (2001).
4. O. G. Schmidt and K. Eberl, *Nature* **410**, 168 (2001).

5. M. L. Leadbeater, C. L. Foden, T. M. Burke, J. H. Burroughes, M. P. Grimshaw, D. A. Ritchie, L. Wang, and M. Pepper, *J. Phys.: Condens. Matter* **57**, L307 (1995); M. L. Leadbeater, C. L. Foden, J. H. Burroughes, M. Pepper, T. M. Burke, L. Wang, M. P. Grimshaw, and D. A. Ritchie, *Phys. Rev. B* **52**, 8629 (1995).
6. C. L. Foden, M. L. Leadbeater, and M. Pepper, *Phys. Rev. B* **52**, 8646 (1995).
7. А. А. Быков, А. К. Бакаров, А. В. Горан, А. В. Латышев, А. И. Торопов, *Письма в ЖЭТФ* **74**, 182 (2001).
8. Л. И. Магарилл, Д. А. Романов, А. В. Чаплик, *ЖЭТФ* **113**, 1411 (1998); Л. И. Магарилл, А. В. Чаплик, *ЖЭТФ* **115**, 1478 (1999).
9. А. И. Ведерников, А. В. Чаплик, *ЖЭТФ* **117**, 449 (2000).
10. В. М. Осадчий, В. Я. Принц, *Письма в ЖЭТФ* **72**, 451 (2000).
11. R. C. T. da Costa, *Phys. Rev. A* **23**, 1982 (1981).
12. H. Jensen and H. Koppe, *Ann. Phys.* **46**, 586 (1971).
13. N. Ogawa, K. Fujii, and A. Kobushukin, *Progr. Theor. Phys.* **83**, 894 (1990).
14. M. V. Entin and L. I. Magarill, *Phys. Rev. B* **64**, 085330 (2001).
15. M. V. Entin and L. I. Magarill, *Phys. Rev. B* **66**, 205308 (2002).
16. M. V. Berry, *Proc. Roy. Soc. A* **392**, 45 (1984).
17. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, Наука, Москва (1984).