

# ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР И ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В АПЕРИОДИЧЕСКИХ ЦЕПОЧКАХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

*П. Ю. Коротаев\*, Ю. Х. Векилов, Н. Е. Капуткина*

*Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»  
119049, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 28 июля 2013 г.

Электронные энергетические спектры аперриодических цепочек Тью–Морзе, Рудина–Шапиро и двупериодической цепочки квантовых точек исследованы в приближении сильной связи. Изучена зависимость спектра от всех параметров «смешанной» модели аперриодической цепочки: электронной энергии в квантовых точках и интегралов перекрытия. Электронная степень локализации в рассматриваемых цепочках получена с помощью анализа обратной степени участия. Рассчитано ее спектральное распределение и зависимость средней по зоне степени локализации от указанных параметров модели. Показано, что при варьировании параметров возможен переход узлов системы в резонансное состояние, в котором степень локализации электронов уменьшается, а в спектре при этом происходит перекрытие подзон.

DOI: 10.7868/S0044451014020151

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Аперриодическая система это система, элементы или свойства которой распределены в определенном, но не периодическом порядке. Такого рода структуры, например слоистые материалы, в настоящее время активно изучаются и применяются в электронике, оптике, лазерной технике. Их особенностями, по сравнению с периодическими аналогами, являются сложный фрагментированный спектр, острые пики проводимости, наличие критических состояний, дополнительные типы симметрии [1]. Другой важной особенностью аперриодических систем является то, что они предоставляют добавочные степени свободы для получения требуемых свойств, т. е., меняя аперриодический закон, по которому распределены элементы системы, можно существенно изменять ее свойства. Кроме того, большое влияние на свойства аперриодической системы оказывает изменение ее параметров (например, изменение толщины слоев или материала, из которого они изготовлены) даже в рамках одного аперриодического закона.

В аперриодическом порядке могут располагаться, конечно, различные объекты. В настоящей работе

были рассмотрены аперриодические цепочки из квантовых точек в приближении сильной связи. Мы изучили, как на электронный спектр и транспортные свойства таких систем влияет варьирование ее параметров: энергии электрона в квантовой точке, связи между квантовыми точками, размеров системы и типа аперриодического закона. Насколько нам известно, такое исследование в настоящее время отсутствует. Кроме того, в основном, рассматривались упрощенные узельная и трансфер-модели [2–5], в то время как в работе рассмотрена смешанная модель аперриодической системы (см. ниже). В работе [6] была изучена смешанная модель цепочки Тью–Морзе, однако анализ спектра и степени локализации электронов при варьировании параметров не проводился.

Аперриодическому порядку, в котором располагаются элементы системы, соответствует определенная аперриодическая последовательность. В работе рассмотрены три аперриодические последовательности: Тью–Морзе, двупериодическая, Рудина–Шапиро. Они являются последовательностями замещения, т. е. каждое их образование может быть получено из предыдущих посредством некоторого правила замещения. Образования последовательности Тью–Морзе имеют вид  $A$ ,  $AB$ ,  $ABBA$ ,  $ABBAABAAB$ , ..., а правило заме-

\*E-mail: pvl.korotaev@gmail.com

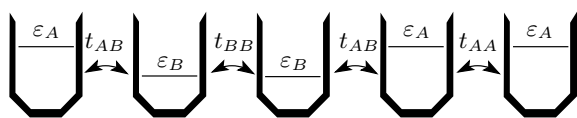


Рис. 1. Пример аперриодической цепочки  $ABBA$  квантовых точек

щения —  $A \rightarrow AB, B \rightarrow BA$ . Двупериодическая последовательность может быть задана с помощью следующего правила замещения:  $A \rightarrow AB, B \rightarrow AA$ , и ее образования:  $A, AB, ABAA, ABAAABAB, \dots$ . Последовательность Рудина–Шапиро в случае двухбуквенного алфавита можно задать, например, так:  $AA, AAAB, AAABAABA, \dots$ , с использованием следующих правил замещения:  $AA \rightarrow AAAB, AB \rightarrow AABA, BA \rightarrow BVAB, BB \rightarrow BVBA$ .

Гамильтониан цепочки квантовых точек имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + \sum_{n=1}^N |n\rangle t_{n,n+1} \langle n+1| + |n\rangle t_{n,n-1} \langle n-1|, \quad (1)$$

где  $N$  — число узлов в системе,  $\varepsilon_n$  — энергия электрона на  $n$ -м узле,  $t_{n,n\pm 1}$  — интеграл перекрытия между узлами  $n$  и  $n \pm 1$ .

Исследуемая система представляет собой цепочку одноэлектронных квантовых точек, которые обозначаются  $A$  и  $B$ . Энергии электронов в них имеют значения соответственно  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$ . Интегралы перекрытия могут принимать одно из трех возможных значений:  $t_{AA}, t_{AB}$  и  $t_{BB}$ . Мы использовали так называемую смешанную модель аперриодической цепочки, в которой в аперриодическом порядке меняются как узельные энергии, так и интегралы перекрытия. Эта модель полнее описывает аперриодическую цепочку квантовых точек, чем ее аналоги, в которых пренебрегается изменением интегралов перекрытия (узельная модель) или узельных энергий (трансфер-модель). Пример аперриодической цепочки квантовых точек изображен на рис. 1.

Для расчетов некоторых спектральных характеристик (см. ниже) были использованы шесть наборов параметров, различающихся соотношениями между интегралами перекрытия. Они приведены в таблице. Величина узельной энергии  $\varepsilon$  соответствует положению нулевого уровня энергии посередине между уровнями  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$ , так что  $\varepsilon_A = -\varepsilon_B = \varepsilon$ .

Таблица. Параметры расчетов для смешанной модели

	$\varepsilon, \text{эВ}$	$t_{AA}, \text{эВ}$	$t_{AB}, \text{эВ}$	$t_{BB}, \text{эВ}$	$N$
1	0.5	1.4	0.6	0.9	256
2	0.5	0.6	1.4	0.9	256
3	0.5	0.9	0.6	1.4	256
4	0.5	0.9	1.4	0.6	256
5	0.5	1.4	0.9	0.6	256
6	0.5	0.6	0.9	1.4	256

## 2. ЭЛЕКТРОННЫЙ СПЕКТР

Электронные энергетические спектры были получены численной диагонализацией гамильтониана (1). Пример зависимости спектров исследуемых цепочек от одного из интегралов перекрытия и от узельной энергии представлен на рис. 2. Меняется один из параметров модели, остальные параметры при этом соответствуют набору параметров 1 из таблицы. Наложение нескольких периодов в расположении элементов приводит к тому, что спектр состоит из многих щелей и подзон. Их положение и ширина определяются типом аперриодической последовательности. Видно, что варьирование данных параметров может приводить к перекрытию подзон и открытию щелей. Это явление обсуждается далее в разд. 3. Спектр имеет несимметричную относительно центра зоны структуру. Это отличительная особенность «смешанной» модели, так как в этом случае в аперриодическом порядке распределены и узельные энергии и интегралы перекрытия.

## 3. СТЕПЕНЬ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Степень локализации электронов была определена в работе следующим образом. По полученным методом диагонализации гамильтониана собственным функциям  $\psi_i$  была рассчитана обратная степень участия:

$$I_2 = \sum_{i=1} |\psi_i|^4 / \left( \sum_{i=1} |\psi_i|^2 \right)^2, \quad (2)$$

где суммирование ведется по всем узлам цепочки [7, 8]. Волновая функция на каждом узле представляется в виде степенной зависимости  $\psi(r) = r^{-\alpha}$ , где  $\alpha$  — степень локализации. Теперь по рассчитанной  $I_2$  и известной  $I_2(\alpha)$  для данной цепочки можно

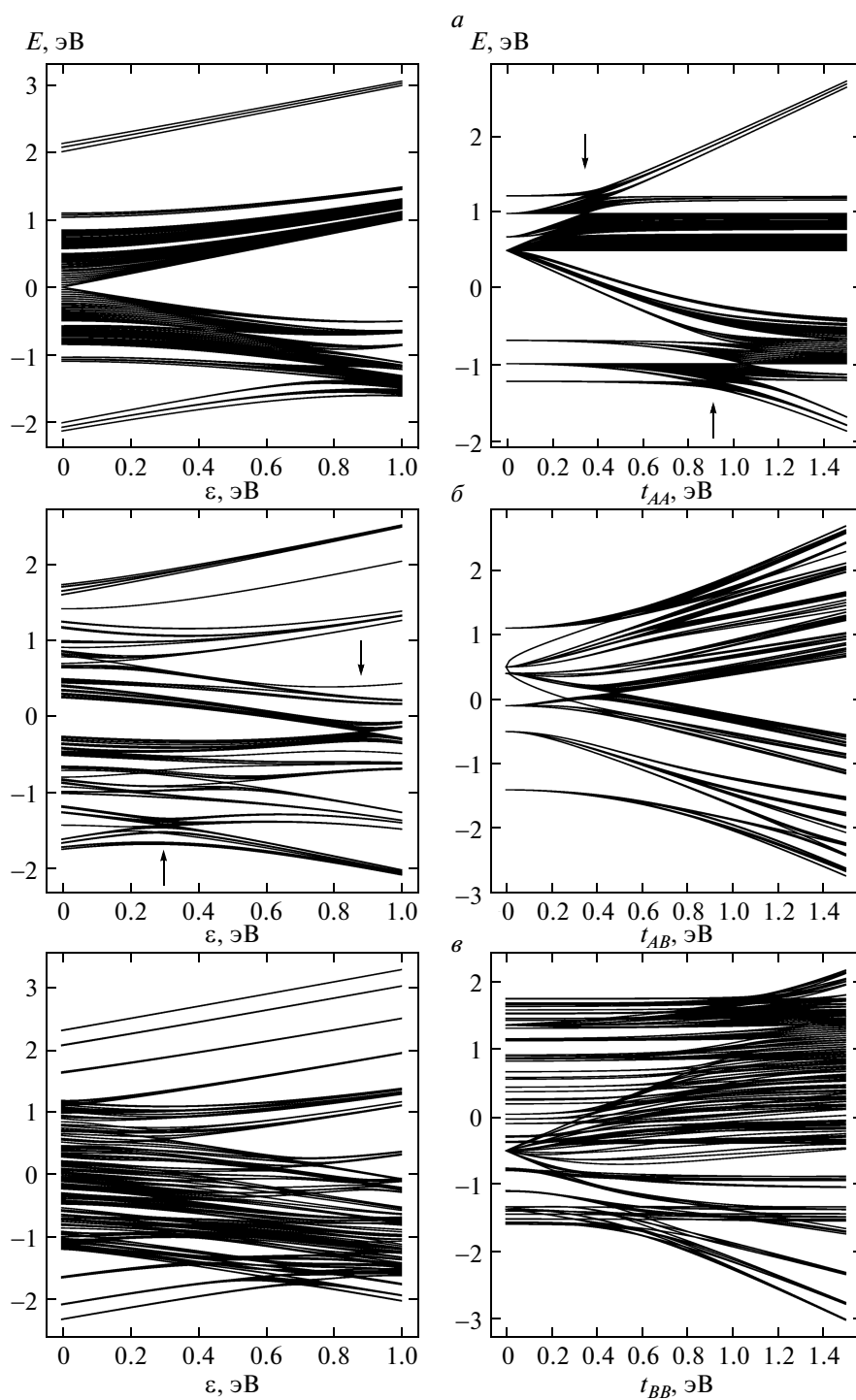
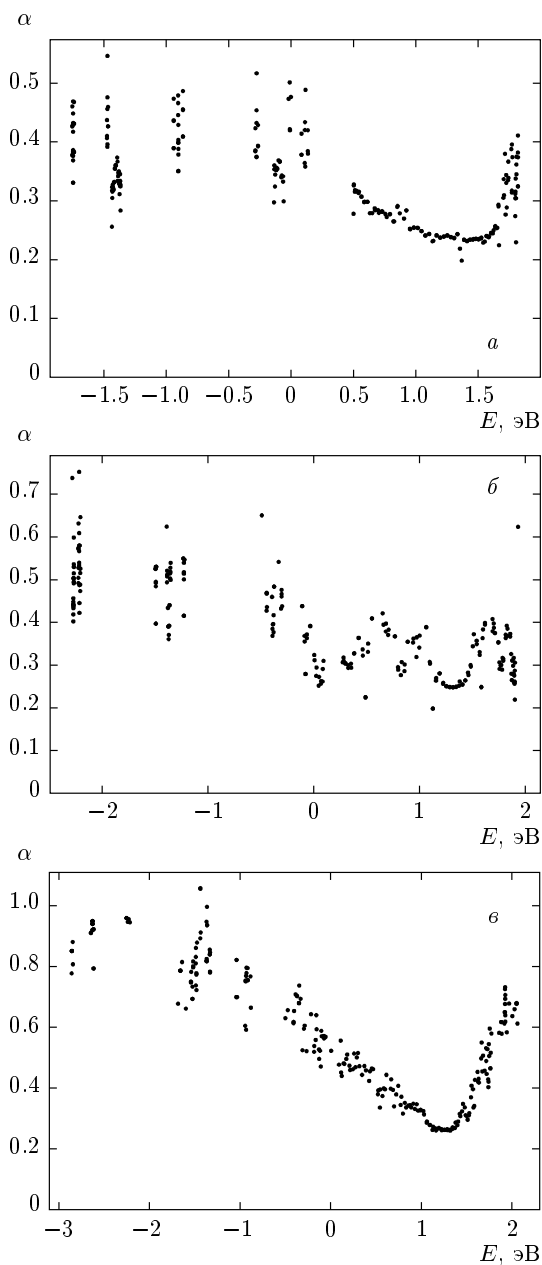


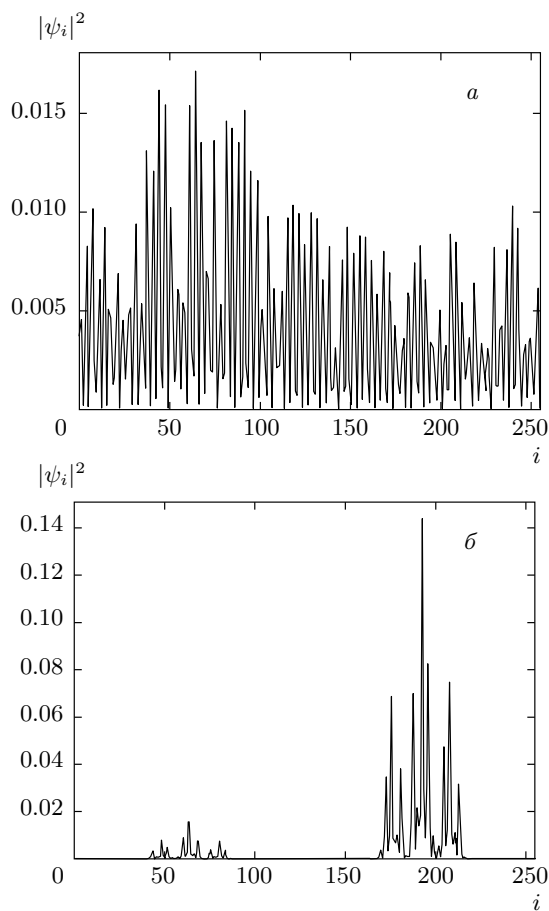
Рис. 2. Электронный энергетический спектр аперриодических цепочек (*a* — дупериодической, *б* — Тью–Морзе, *в* — Рудина–Шапиро) в зависимости от величины узельной энергии  $\varepsilon$  и величины одного из интегралов перекрытия  $t$ . Остальные параметры при этом соответствуют набору 1 из таблицы



**Рис. 3.** Спектральное распределение степени локализации в аперiodических цепочках: *a* — двупериодическая, *б* — Тью–Морзе, *в* — Рудина–Шапиро. Набор параметров *б* из таблицы

определить  $\alpha$ . По величине нормировочного интеграла  $\int |\psi_i|^2 dr$  различают протяженные состояния при  $\alpha = 0$ , локализованные состояния при  $\alpha \geq 1/2$  и критические состояния с  $0 < \alpha < 1/2$ .

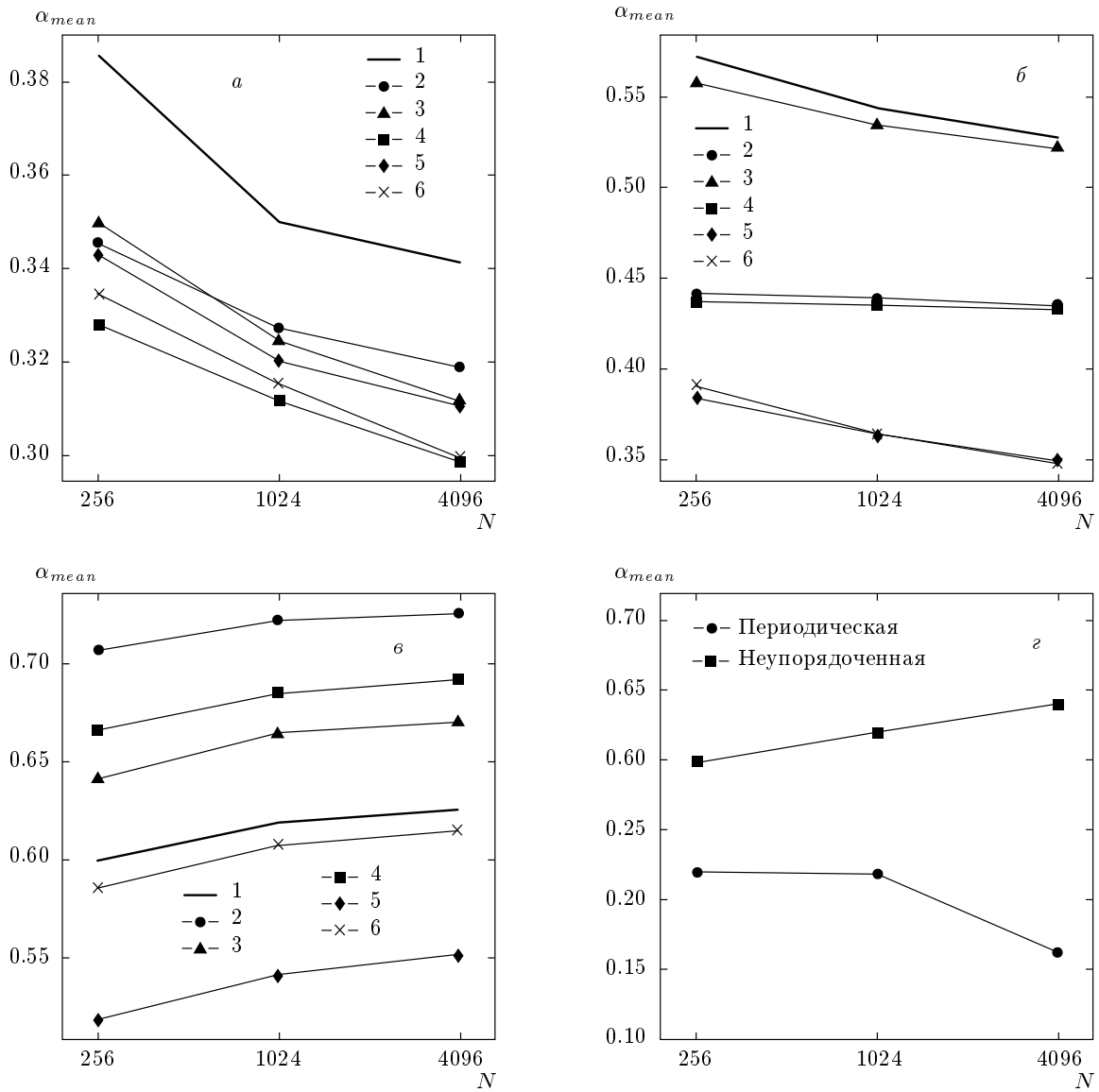
Спектральное распределение степени локализации в исследуемых цепочках на примере шестого набора параметров из таблицы представлено на рис. 3.



**Рис. 4.** Критическая (*a*) и локализованная (*б*) волновые функции в цепочке Тью–Морзе. В первом случае есть конечная вероятность найти электрон на любом узле, а во втором — электрон локализован лишь на некоторых группах узлов

Степень локализации распределена неоднородно как по полной зоне, так и по подзонам спектра, что вызвано его в общем случае несимметричной структурой. Как видно на рис. 3, степень локализации состояний, близких друг к другу по энергии и лежащих в одной минизоне, может заметно различаться. В цепочках существуют области как локализованных, так и критических состояний, для которых  $0 < \alpha < 1/2$  (см. рис. 4). Причиной их существования является деструктивная интерференция отраженных от потенциальных барьеров волн в противоположность андерсоновской локализации, которая вызвана их конструктивной интерференцией.

Спектральное распределение степени локализации важно для определения транспортных свойств системы, поскольку последние определяются состоянием электронов вблизи уровня Ферми. Меняя поло-



**Рис. 5.** Средняя по зоне степень локализации электронов  $\alpha_{mean}$  в зависимости от размера системы  $N$  в аперриодических цепочках (а — двупериодическая, б — Тью-Морзе, в — Рудина-Шапиро, г — периодическая и неупорядоченная цепочки) для шести наборов параметров из таблицы

жение этого уровня, можно добиваться, таким образом, различной проводимости системы. Для оценки общих тенденций в изменении степени локализации электронов в системе была рассчитана средняя по зоне степень локализации и изучена ее зависимость от параметров модели: электронной энергии в квантовых точках, интегралов перекрытия и размера системы.

Зависимость средней степени локализации в исследуемых цепочках от размера системы показана на рис. 5. Аналогичные зависимости для неупорядоченной

(имеется в виду отсутствие даже аперриодического порядка) и периодической цепочек показаны на этом же рисунке. Два основных результата заключаются в следующем.

Во-первых, в цепочке Тью-Морзе и в двупериодической цепочке средняя степень локализации ведет себя так же, как и в периодической цепочке. В последней средняя степень локализации стремится к нулю, что соответствует протяженным состояниям в бесконечной периодической системе. Цепочка Рудина-Шапиро, напротив, подобна неупорядоченной

ной системе, состояния в которой локализируются с увеличением ее размера. Причиной разного поведения степени локализации является различие аперидических законов, по которым расположены элементы. В цепочке Тью–Морзе и в дупериодической цепочке корреляции в распределении потенциала приводят к тому, что отраженные от барьеров волны деструктивно интерферируют. В цепочке Рудина–Шапиро эта интерференция имеет другой характер. Однако, как уже говорилось выше, степень локализации электронов неоднородно распределена по зоне, и, несмотря на то, что средняя степень локализации соответствует локализованным состояниям ( $\alpha_{mean} > 1/2$ ), в спектре существуют критические слаболокализованные состояния (см. рис. 3z). В неупорядоченной же цепочке почти все состояния при аналогичных параметрах являются локализованными. Во-вторых, величина степени локализации, как и величина ее изменения, сильно зависит от параметров системы даже в рамках одного аперидического закона.

На рис. 6 представлена зависимость средней степени локализации от параметров модели: узельной энергии  $\epsilon$  и интегралов перекрытия  $t_{AA}$ ,  $t_{AB}$  и  $t_{BB}$ . Зависимость от узельной энергии рассчитана для всех шести наборов параметров из таблицы, а для интегралов перекрытия — для первого набора (по аналогии с рис. 2).

Поскольку величина узельной энергии  $\epsilon$  характеризует беспорядок в системе в смысле разницы в энергиях электронов на узлах, с ее увеличением средняя степень локализации возрастает. Однако при некоторых значениях параметров системы возможно уменьшение степени локализации и образование ее минимумов. Это показано стрелками на примере первого набора параметров для цепочки Тью–Морзе. В спектре системы при этих параметрах происходит перекрытие подзон, также показанное стрелками на рис. 2. Причиной такой делокализации является резонансное состояние узлов системы. Действительно, если есть какие-то два состояния, разделенные щелью, и в каждом из этих состояний электрон локализован на какой-то группе узлов, то при выравнивании энергий этих состояний группы узлов становятся резонансными и электрон теперь может перемещаться по всем узлам. Его волновая функция становится более «размазанной» по системе (рис. 4).

Аналогичная ситуация имеет место, если изменять интегралы перекрытия. Это показано стрелками на примере дупериодической цепочки на рис. 2, 6. Минимумам степени локализации при  $t_{AA} \sim$

$\sim 0.3$  эВ и  $t_{AA} \sim 0.9$  эВ соответствует перекрытие подзон в спектре. Заметим, что в дупериодической цепочке отсутствуют пары типа  $BB$ , поэтому варьирование  $t_{BB}$  не дает никакого эффекта.

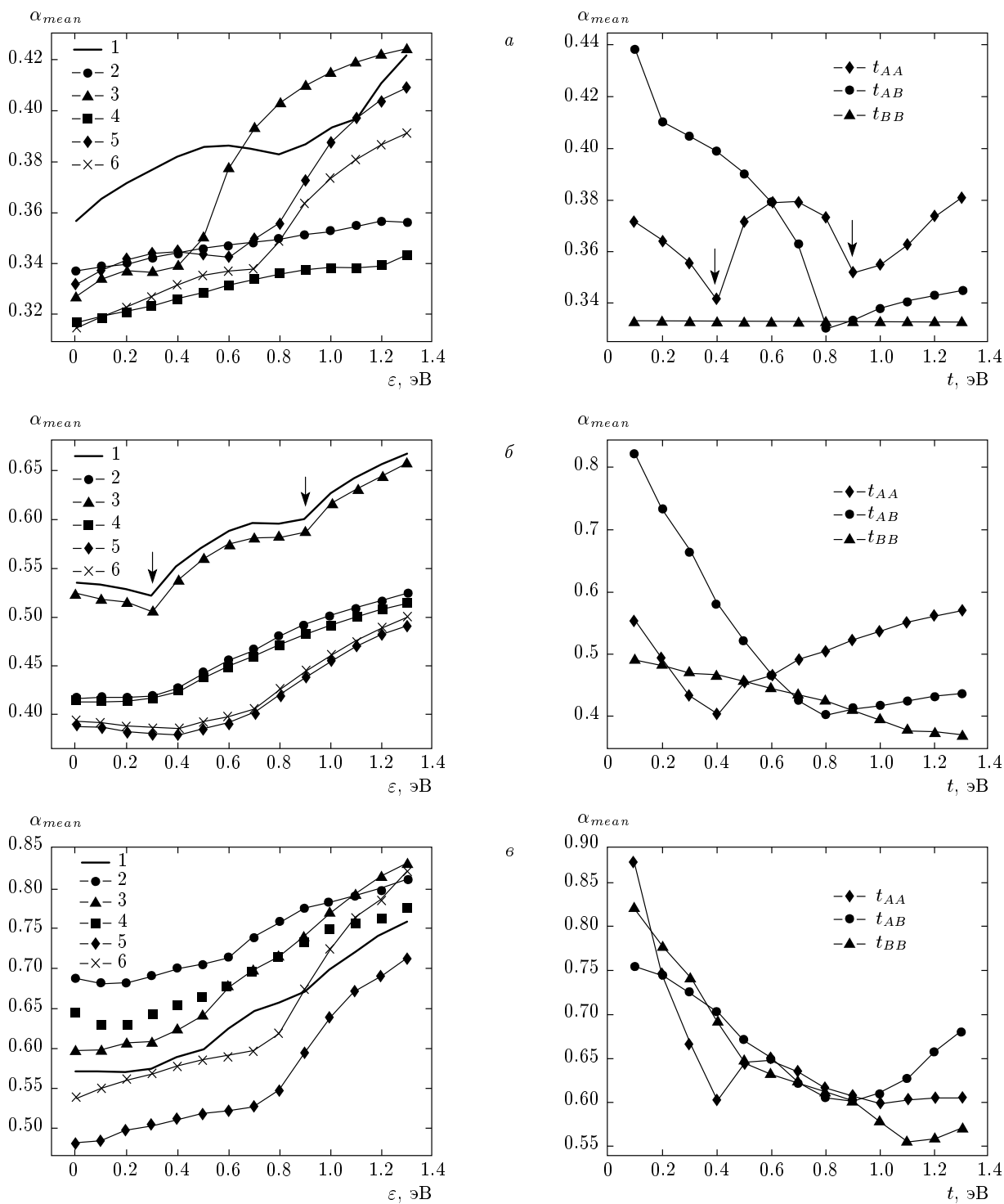
В цепочке Рудина–Шапиро, несмотря на ее близость к неупорядоченной системе, также возможен переход узлов в резонансное состояние при варьировании параметров.

Описанное состояние резонанса может быть достигнуто выбором определенного аперидического закона и параметров системы: энергии электронов в квантовых точках и интегралов перекрытия. Кроме того, в системе возможно осуществить настройку резонанса при помощи, например, внешнего магнитного поля. Магнитное поле вызовет изменение электронной энергии в квантовых точках [9], и это, как показано выше, может приводить к резонансному состоянию узлов.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом численной диагонализации гамильтониана в приближении сильной связи получены электронные энергетические спектры аперидических цепочек квантовых точек. Рассмотрены цепочки квантовых точек Тью–Морзе, дупериодическая цепочка и цепочка Рудина–Шапиро и использована смешанная модель аперидической системы, когда в аперидическом порядке распределены и энергии электронов в квантовых точках, и интегралы перекрытия. Изучена зависимость спектра от параметров модели: узельной энергии и интегралов перекрытия. Показано, что даже при рассмотрении одноэлектронных квантовых точек при варьировании параметров возможно перекрытие подзон спектра и открытие щелей. Это вызвано наложением нескольких периодов в расположении элементов.

Путем анализа обратной степени участия получена степень локализации электронных состояний в рассматриваемых системах. Исследовано ее спектральное распределение и показано, что оно неоднородно. Изучена зависимость средней по зоне степени локализации от параметров модели. С ростом размера системы цепочки Тью–Морзе и дупериодическая ведут себя подобно периодическим системам — средняя степень локализации в них уменьшается, в цепочке Рудина–Шапиро — как неупорядоченной системе — степень локализации увеличивается. Обнаружено, что при варьировании параметров модели система может переходить в резонансное состояние, в котором



**Рис. 6.** Зависимость средней по зоне степени локализации электронов  $\alpha_{mean}$  в аперриодических цепочках (*a* — дву-периодической, *b* — Тью-Морзе, *e* — Рудина-Шапиро) от параметров модели — узельной энергии  $\epsilon$  для шести наборов параметров (из таблицы) и от всех типов интегралов перекрытия  $t$ . Указанным стрелками минимумам степени локализации соответствуют перекрытия подзон на рис. 2

степень локализации электронов уменьшается. Такое состояние наступает при перекрытии подзон в спектре, когда выравниваются энергии состояний, в которых электрон локализован на определенной группе узлов, и становится возможно резонансное туннелирование.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 12-02-31641, 11-02-00604-а, 13-07-00409), а также в рамках Программы создания и развития НИТУ «МИСиС».

#### ЛИТЕРАТУРА

1. E. Maciá, Rep. Progr. Phys. **75**, 036502 (2012).
2. L. Kroon and R. Riklund, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 4519 (2003).
3. M. Bakhtiari, P. Vignolo, and M. Tosi, Physica E **28**, 385 (2005).
4. E. Albuquerque and M. Cottam, Phys. Rep. **376**, 225 (2003).
5. J. M. Luck, Phys. Rev. B **39**, 5834 (1989).
6. A. Ghosh and S. N. Karmakar, Phys. Rev. B **58**, 2586 (1998).
7. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, Phys. Rev. B **83**, 184206 (2011).
8. Hirokazu Tsunetsugu et al., Phys. Rev. B **43**, 8879 (1991).
9. P. Korotaev, Yu. Vekilov, and N. Kaputkina, Physica E **44**, 1580 (2012).