## Физика низкоразмерных систем. Курс лекций

М.М. Глазов

9 марта 2022 г.

## Оглавление

Оглавление 1					
Список основных обозначений 3					
Введение 4					
1	Низ	зкоразмерные системы	6		
	1.1	Очем наш курс?	6		
	1.2	Изгионые колеоания двумерных и одномерных кристаллов	8		
	1.3	Изгибные флуктуации двумерных систем	11		
2	Me	год эффективного гамильтониана	13		
	2.1	Теория возмущений для вырожденного спектра	13		
	2.2	Метод эффективного гамильтониана	17		
	2.3	Оператор координаты электрона в кристалле	19		
3	Спин-орбитальное взаимодействие и модели зонной струк-				
	тур	ы	<b>22</b>		
	3.1	Спин-орбитальное взаимодействие	22		
	3.2	Гамильтониан Латтинжера	25		
	3.3	Модель Кейна	28		
	3.4	Модель Берневига-Хьюза-Жанга	33		
	3.5	Модель Вейля	34		
	3.6	Модель Дирака	36		
4	Пое	зерхностные и краевые состояния в топологических изо	-		
	ляторах 37				
	4.1	Плавный гетеропереход	38		

	4.2	Состояния на поверхности объемного топологического изо- лятора	39		
	4.3	Краевые состояния в двумерных системах	42		
	4.4	Числа Черна и топологические инварианты	42		
5	Размерное квантование и граничные условия для плав-				
	ных	согибающих	44		
	5.1	Граничные условия	44		
	5.2	Структуры с квантовыми ямами	47		
	5.3	Квантовые проволоки и квантовые точки	50		
	5.4	Локализация электронов на флуктуациях ширины кванто-			
		вых ям и проволок	51		
	5.5	Энергетическая плотность состояний	52		
6	Метод матриц переноса				
	6.1	Матрица переноса	54		
	6.2	Матрица переноса через произвольный барьер	56		
	6.3	Двухбарьерные структуры	58		
	6.4	Периодические системы	60		
		сталлах	62		
7	Туннельный транспорт электронов				
	7.1	Туннельный ток в электрическом поле	65		
	7.2	Транспорт в одномерных системах. Формула Ландауэра	67		
Приложение. Матрицы углового момента 3/2					
Bo	Вопросы и задачи для самостоятельной работы				
С	Список литературы				

## Список основных обозначений

$oldsymbol{\Omega}_{nn'}(oldsymbol{k})$	вклад в оператор координаты, обусловленный наличием бло-
	ховских амплитуд
$m{k}$	квазиволновой вектор
$\hat{\mathcal{H}}(oldsymbol{k}), \; \mathcal{H}(oldsymbol{k})$	$m{k}\cdotm{p}$ -гамильтониан (эффективный гамильтониан)
$\lambda_T$	тепловая длина волны квазичастицы
S	нормировочная площадь
$\mathcal{V}$	нормировочный объем
$\psi_{n,oldsymbol{k}}(oldsymbol{r})$	функция Блоха
a	характерный размер системы
$a_0$	постоянная кристаллической решетки
d = 0, 1, 2, 3	размерность системы
$k_B$	постоянная Больцмана
m	эффективная масса
T	температура
$u_{n,oldsymbol{k}}(oldsymbol{r})$	периодическая (блоховская) амплитуда

## Введение

Дисциплина "Физика низкоразмерных систем" (ФНС) имеет своей целью приобретение студентами углубленных знаний о физических свойствах твердотельных структур пониженной размерности – наноструктур (квантовых ям, нитей, точек, нанокристаллов, нанотрубок, структур с экстремальной двумерностью), и развитие навыков в расчете электронных, фотонных и фононных состояний в полупроводниковых наноструктурах и анализе их физических свойств.

Дисциплина предполагает лекции и домашние задания, а также курсовую работу. Длительность курса – 1 семестр.

Желательные предварительные знания студентов включают базовые курсы

- 1. Курс высшей математики (включая теорию функций комплексной переменной и теорию вероятностей);
- 2. Курсы теоретической физики: механика, классическая электродинамика и элементы электродинамики сплошных сред, квантовая механика;

и курс физики конденсированных сред. Достаточно знаний, например, в рамках лекционного курса: "Физика конденсированных сред".

## Подготовительная литература по физике конденсированных сред

- 1. А.И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников, М.: Наука (1978).
- 2. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, М.: Наука (1972).
- Г.Г. Зегря, В.И. Перель, Основы физики полупроводников, М.: Физматлит (2009).

- 4. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, Физика твердого тела, М.: Мир (1979).
- 5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика. Часть 1*, М.: Наука (1976).
- А. Анималу, Квантовая теория кристаллических твердых тел, М.: Мир (1981).
- 7. М.И. Петрашень, Е.Д. Трифонов, *Применение теории групп в кван*товой механике, М.: УРСС (2002).

#### Литература по курсу ФНС

Указанный список литературы не является ни исчерпывающим, ни обязательным.

- 1. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, М. Наука (1972).
- 2. Питер Ю, Мануэль Кардона, Основы физики полупроводников, Физматлит (2002).
- Зегря Г.Г., Перель В.И., Основы физики полупроводников, Физматлит (2009).
- 4. E.L. Ivchenko, E.G. Pikus, Superlattices and Other Heterostructures: Symmetry and Optical Phenomena, Springer-Verlag (1995), 2nd ed. (1997).
- 5. E.L. Ivchenko, Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures, Alpha Science, Harrow UK (2005).
- 6. Воробьёв Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Оптические свойства наноструктур, мет. пособие (2001).
- J.H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductos, Cambridge University Press (1998).

## Лекция 1

### Низкоразмерные системы

На этой лекции мы познакомимся с низкоразмерными системами, или, как их еще называют, наносистемами и рассмотрим в качестве примера одну яркую и необычную особенность таких систем, связанную с их колебательными свойствами.

### 1.1 О чем наш курс?

Часто, когда говорят о системах пониженной размерности, или низкоразмерных системах, или наносистемах, или наноструктурах (а эти термины зачастую используют для одних и тех же систем) имеют в виду таких материальные системы, естественные или искусственные, где важны (или, более строго, ярко проявляются) квантовые свойства электронов. Мы хорошо знаем, что квантовые свойства электронов, вообще говоря, важны почти всегда, но зачастую в физике объемных кристаллов и других конденсированных сред неплохо работает квазиклассическое описание.

Важным критерием необходимости квантовомеханического описания является соотношение между тепловой или де-бройлевской длиной волны электрона  $\lambda_T$  и характерного размера системы *a*. Рассмотрим кристалл размера *a* и сделаем грубую оценку

$$\lambda_T \sim \sqrt{\frac{\hbar^2}{mk_BT}} \sim 15 \text{ Å}$$
 при температуре  $T = 300 \text{ K}.$ 

Здесь m – эффективная масса электрона, для оценки можно взять m =

 $m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона,  $k_B$  – постоянная Больцмана, T – температура. Квантовомеханическое описание требуется, если

$$a \lesssim \lambda_T.$$
 (1.1)

Таким образом характерный размер структуры, где квантовые эффекты проявятся наиболее ярко  $a \leq 1.5$  nm – отсюда и термин наносистемы. Ясно, что с понижением температуры длины волны возрастает, поэтому квантовые эффекты могут проявляться и для структур несколько больших размеров (десятки, а иногда и сотни нанометров).

Основной эффект, который естественно необходимо учитывать при выполнении условия (1.1) – эффект размерного квантования: пространственное ограничение движения электрона приводит к дискретному энергетическому спектру.<sup>1</sup> Условие (1.1) можно переписать в виде

$$\frac{\hbar^2}{ma^2} \gtrsim k_B T. \tag{1.2}$$

Здесь в левой части стоит характерное расстояние между энергетическими уровнями в яме с характерным размером *a*, а в правой – температура. Очевидно, что эффекты размерного квантования будут проявляться если расстояние между уровнями превышает тепловую энергию носителя заряда.

Низкоразмерные системы удобно характеризовать по числу степеней свободы, для которых движение свободно:

- 2D (двумерные системы): движение носителей заряда свободно в двух направлениях (в плоскости), в третьем направлении квантуется. *Примеры:* квантовая яма, моноатомный слой графена.
- 1D (одномерные системы): движение носителей заряда свободно в одном пространственном направлении (вдоль оси), а в двух других квантуется. *Примеры:* углеродная нанотрубка, квантовая проволока, нановискер.
- **ОD** (нульмерные системы): имеется размерное квантование по всем трем направлениям. *Примеры:* квантовая точка, нанокристалл.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Напоминание: в объемных неограниченных кристаллах спектр состоит из непрерывных полос – разрешенных зон.

Можно сказать, что в наносистемах эффективная размерность пространства d меньше, чем 3, поэтому такие системы и называют низкоразмерными.

Наносистемы являются полигоном для квантовой физики, многие наноструктуры уже нашли применения, поэтому их важно изучать. Они демонстрируют яркие и необычные свойства, а многие модели, развитые для описание наносистем допускают красивые и точные решения, которые можно использовать и в других областях физики.

Мы в основном будем изучать электронные и оптические свойства наносистем, но об одной особенности двумерных и одномерных структур, связанных с колебаниями кристаллических решеток, нельзя не упомянуть.

### 1.2 Изгибные колебания двумерных и одномерных кристаллов

Напомним, что в объемном (трехмерном) кристалле с *s* атомами в элементарной ячейке имеются 3*s* колебательных мод: 3 акустические ветви дисперсии, частота которых при малых волновых векторах  $q \to 0$  линейно зависит от волнового вектора  $\omega \propto q$ , и 3*s* – 3 оптические ветви, частоты которых при  $q \to 0$  стремятся к конечному пределу.

Одномерные и двумерные системы находятся в физическом трехмерном пространстве. Это приводит к особенностям в спектрах колебаний в случае, если атомы смещаются из плоскости двумерной системы или от оси одномерной.

Для простоты рассмотрим одномерную цепочку атомов, расположенных вдоль оси x, и изучим колебания, при которых атомы смещаются вдоль перпендикулярного направления, которое обозначим как z, см. рис. 1.1.

Для начала проанализируем колебания в модели центральных сил, где предполагается, что сила взаимодействия между атомами F зависит лишь от расстояния между ними. Обозначив за  $a_0$  постоянную решетки, а за  $h_n$  смещение атома n вдоль z (рис. 1.1), легко видеть, что изменение расстояния между атомами n - 1 и n при малых смещениях  $|h_n| \ll a_0$  равно

$$l_n - a_0 = \sqrt{a_0^2 + (h_n - h_{n-1})^2} - a_0 \approx \frac{(h_n - h_{n-1})^2}{2a_0},$$



Рис. 1.1: Иллюстрация изгибных колебаний одномерной цепочки.

а z-компонента возвращающей силы  $F_z \propto h_n^3$ . Ясно, что в таком приближении не возникает гармонических колебаний: возвращающая сила нелинейная функция смещений, система оказывается слишком "мягкой".<sup>2</sup>

Рассмотрение, приведенное выше, не учитывает изменение углов химических связей,  $\varphi_n$  на рис. 1.1, т.е. изгибные деформации цепочки. Для малых смещений атомов удобно рассматривать углы  $\theta_n = \pi - \varphi_n$ , для которых легко получить следующее выражение

$$\theta_n = \frac{h_{n+1} - h_n}{a_0} - \frac{h_n - h_{n-1}}{a_0} = \frac{1}{a_0}(h_{n+1} + h_{n-1} - 2h_n).$$
(1.3)

Формула (1.3) показывает, что соответствующие взаимодействия не сводятся к центральным силам, такое взаимодействие можно назвать трехцентровым (участвуют три атома).

Запишем вклад в потенциальную энергию цепочки, обусловленный изгибами:

$$\Phi = \sum_{n} \frac{\varkappa \theta_n^2}{2a_0},\tag{1.4a}$$

где мы ввели (феноменологически) параметр », описывающий изгибную

 $<sup>^{2}</sup>$ Напомним, что приближения центральных сил вполне достаточно для описания продольных колебаний, где смещения атомов происходят вдоль оси x.

жесткость. Кинетическая энергия

$$K = \sum_{n} \frac{M\dot{h}_n^2}{2},\tag{1.4b}$$

где M – масса атома,  $h = \partial h_n / \partial t$ .

Нас будут интересовать особенности дисперсии фононов при малых волновых векторах,  $qa_0 \ll 1$ , поэтому удобно от дискретной модели (1.4) перейти к континуальной. Соответственно, вводим функцию h(x, t), причем  $h_n = h(a_0 n)$ . Легко видеть из (1.3), что

$$\theta_n = a \frac{\partial^2 h}{\partial x^2},$$

поэтому

$$K = \int dx \frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial t}\right)^2, \quad \Phi = \int dx \frac{\varkappa}{2} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)^2, \tag{1.5}$$

где $\rho=M/a_0$ – плотность массы. Из (1.5) можно получить уравнения движения  $^3$ 

$$\rho \frac{\partial^2 h}{\partial t^2} = -\varkappa \frac{\partial^4 h}{\partial x^4}.$$
(1.6)

Отметим, что в отличие от "обычных" (продольных в одномерном случае) колебаний потенциальная энергия изгибных колебаний содержит квадрат второй производной смещений. Это связано с тем, что поворот системы как целого, когда  $h_n \propto n$  или  $h(x,t) \propto x$  не изменяет энергию системы. Соответственно, в динамическом уравнении (1.6) в правой части стоит четвертая производная по координатам, а не вторая как в обычном волновом уравнении. Соответственно, для  $h(x,t) \propto \exp(-i\omega t + iqx)$  получаем дисперсионное соотношение в виде  $\rho\omega^2 = \varkappa q^4$  или

$$\omega = \sqrt{\frac{\varkappa}{\rho}} q^2. \tag{1.7}$$

Видно, что закон дисперсии изгбных колебаний "мягкий"  $\omega \propto q^2$ .

Аналогичная квадратичная дисперсия имеет место и для двумерных систем, например, для свободного графена. В дискретной модели удобно параметризовать энергию углами между нормалями к элементарным

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Проще всего составить функцию Лагранжа  $L = K - \Phi$  вычислить ее вариацию при вариации  $h(x,t) \rightarrow h(x,t) + \delta h(x,t)$ .



Рис. 1.2: Иллюстрация изгибов двумерного кристалла.

ячейкам, рис. 1.2,  $\Phi \propto \sum_{ij} (n_i \cdot n_j)$ . В континуальном приближении [ср. с (1.4a) и (1.5)

$$\Phi = \int dx dx \frac{\varkappa}{2} \left(\Delta \zeta\right)^2, \qquad (1.8)$$

где  $\Delta$  – оператор Лапласа,  $\zeta \equiv \zeta(x, y)$  – смещение слоя вдоль его нормали. Таким образом и для двумерных систем работает квадратичный закон дисперсии (1.7) изгибных мод. Такую изгибную моду часто обозначают как ZA (Z отражает то, что речь идет о смещениях вдоль нормали, A – акустический). Естественно, акустические моды, поляризованные в плоскости слоя (LA и TA), обладают линейной дисперсией.

### 1.3 Изгибные флуктуации двумерных систем

Квадратичная дисперсия изгибных фононов приводит к тому, что тепловые колебания решетки приводят к значительным флуктуационным изгибам двумерных и одномерных систем. Особенно интересной оказывается двумерная ситуация. Введем вектор локальной нормали к поверхности (в приближении малых изгибов)

$$\boldsymbol{n} \approx \left(-\frac{\partial \zeta}{\partial x}, -\frac{\partial \zeta}{\partial y}, 1\right),$$
 (1.9)

и вычислим среднеквадратичную флуктуацию  $\langle n_{\perp}^2 \rangle = \langle n_x^2 + n_y^2 \rangle$ , которая описывает насколько локально нормаль к поверхности отклоняется от оси z. Здесь угловые скобки обозначают статистическое усреднение (по возбужденным фононам). Можно показать, что [ср., например, с лекцией 10 курса ФКС]

$$\langle n_{\perp}^2 \rangle \approx \sum_{q} \frac{k_B T}{\hbar \omega_q} q^2 \frac{\hbar}{2\rho S \omega_q} \propto \int \frac{dq}{q}.$$
 (1.10)

Здесь S – нормировочная площадь, множитель  $k_B T/(\hbar \omega_q)$  описывает заселенность фононных состояний в пределе  $\omega_q \ll k_B T$ ,  $\sqrt{\hbar/(2\rho S \omega_q)}$  – "осцилляторная" длина для изгибного фонона.

Интеграл (1.10) логарифмически расходится, указывая на неустойчивость двумерных кристаллов. Двумерные системы могут скомкиваться (crumpling), могут формироваться статические изгибные деформации (ripples).

Задача. Определить корреляционную функцию углов изгиба (или смещений атомов).

## Лекция 2

## Метод эффективного гамильтониана

Цель этой лекции – напомнить основные понятия  $k \cdot p$ -метода теории возмущений (метода эффективного гамильтониана) для описания состояний электрона в кристалле, развить метод учета вкладов "далеких" зон по теории возмущений. В конце лекции речь пойдет о тонком и важном вопросе – форме оператора координаты электрона в кристалле.

# 2.1 Теория возмущений для вырожденного спектра

Многие физические явления в полупроводниках определяются электронными состояниями в нескольких зонах, энергии которых близки по сравнению с зазорами до других зон. Например, в GaAs зона проводимости и валентная зона достаточно близки, а возбужденная зона проводимости о тносительно далека, см. рис. 2.1. Представляется удобным построить эффективный гамильтониан системы, в котором выделенные зоны учитываются точно, а остальные – по теории возмущений.

Пусть  $\hat{H}$  полный гамильтониан системы,  $H_{ij}$  – его матричные элементы. Разобъем гамильтониан на две части: диагональную  $\hat{H}^0$  и возмущение  $\hat{H}^1 = \hat{H} - \hat{H}^0$ . Пусть уровни невозмущенного гамильтониан  $\hat{H}^0$ разбиваются на две группы:  $m_1, m_2, \ldots, m_N$ , расположенных близко друг



Рис. 2.1: Схема зон в GaAs.

от друга, и группу далеких уровней, которые нумеруются индексом s:

$$|E_{m_i} - E_{m_j}| \ll |E_{m_i} - E_s|, |E_{m_j} - E_s|,$$

для любых  $m_i, m_j$  и s. Наша задача состоит в том, чтобы вывести эффективный гамильтониан, действующий в базисе уровней  $m_1, m_2, \ldots, m_N$ , в котором смешивание близких уровней (из группы  $m_1, m_2, \ldots$ ) учитывается точно, а взаимодействие с другими состояниями учитывается в заданном порядке теории возмущений (здесь будет рассмотрен *второй* порядок). Схема уровней приведена на рис. 2.2. Общий метод приведен, например, в Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, М.: Наука, 1972, §15 [1].

Обозначим искомый гамильтониан как  $\mathcal{H}$ , его матричные элементы  $\mathcal{H}_{mm'}$ . Представим волновую функцию системы в виде

$$\Psi = \sum_{m} c_m \psi_m + \sum_{s} c_s \psi_s, \qquad (2.1)$$

где  $\psi_m$  ( $\psi_s$ ) волновые функции выделенных (далеких) состояний,  $c_m$ ,



Рис. 2.2: "Близкие" и "далекие" уровни.

 $c_s$ – коэффициенты разложения. Пусть E– энергия состояния (4.4), а $E_i^{(0)}=H_{ii}^0.$ Запишем уравнение Шредингера  $\hat{H}\Psi=E\Psi$ в виде

$$E_m^{(0)}c_m + \sum_{m'} H^1_{mm'}c_{m'} + \sum_{s'} H^1_{ms'}c_{s'} = Ec_m, \qquad (2.2)$$

$$E_s^{(0)}c_s + \sum_{m'} H^1_{sm'}c_{m'} + \sum_{s'} H^1_{ss'}c_{s'} = Ec_s.$$
(2.3)

В уравнениях (4.4), (2.2) и (2.3) мы отделили суммирования по выделенным (близким) состояниям m и далеким состояниям s.

Легко убедиться в том, что в разложение (4.4) основной вклад вносят выделенные состояния, нумеруемые индексом m. Вовсе пренебрегая вкладом далеких зон можно положить  $c_s \equiv 0$ , тогда

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(1)} = H_{mm'}.$$
 (2.4)

Для нахождения поправок к (2.4) оставим в уравнении (2.3) только сумму по m', а суммой по s' пренебрежем. Тогда (для недиагональных элементов без разницы, писать H и  $H^1$ )

$$c_s \approx \frac{\sum_{m'} H_{sm'} c_{m'}}{E - E_s^{(0)}} \approx \frac{\sum_{m'} H_{sm'} c_{m'}}{E_m^{(0)} - E_s^{(0)}}.$$

Во втором приближенном равенстве мы учили то обстоятельство, что расстояние до уровней группы m велико по сравнению расщеплениями между ними, поэтому в данном приближении вообще не важно, чему равно  $E: E_m^{(0)}$  или  $E_{m'}^{(0)}$  (соответствующие отличия важны в более высоких порядках).

Подставим теперь  $c_s$  в уравнение (2.2):

$$E_m^{(0)}c_m + \sum_{m'} H_{mm'}c_{m'} + \sum_{m'} \sum_s \frac{H_{ms}H_{sm'}}{E_m^{(0)} - E_s^{(0)}}c_{m'} = Ec_m.$$
(2.5)

Полученное уравнение есть ничто иное, как уравнение Шредингера с эффективным гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(2)} = H_{mm'} + \sum_{s} \frac{H_{ms}H_{sm'}}{E_m^{(0)} - E_s^{(0)}}.$$

Отметим, что состояния m и m' должны входить в эффективный гамильтониан симметрично, с той же точностью можно записать окончательно

$$\mathcal{H}_{mm'}^{(2)} = H_{mm'} + \frac{1}{2} \sum_{s} \left( \frac{H_{ms} H_{sm'}}{E_m^{(0)} - E_s^{(0)}} + \frac{H_{ms} H_{sm'}}{E_{m'}^{(0)} - E_s^{(0)}} \right).$$
(2.6)

Указанный метод расчета принадлежит Пер-Олаву Левдину [2], а его краткое изложение приведено в книге В.Н. Абакумова, В.И. Переля и И.Н. Яссиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, С.-Петербург (1997), приложение 1 [3].

Задача. В полупроводниковой квантовой яме основной уровень легкой дырки (lh1) лежит на 30 meV ниже основного уровня тяжелой дырки (hh1). Ширина запрещенной зоны  $E_g = 1.5$  eV определена как расстояние по энергии между уровнем hh1 и основным уровнем электрона e1. Возмущение  $\mathcal{V}$  смешивает состояния валентной зоны друг с другом и с состояниями зоны проводимости, матричные элементы равны

$$\langle hh1|\mathcal{V}|lh1\rangle = V_1, \quad \langle hh1|\mathcal{V}|e1\rangle = V_2, \quad \langle lh1|\mathcal{V}|e1\rangle = V_3, \quad (2.7)$$

где  $V_1,\,V_2$  <br/>и $V_3$ связаны с безразмерным параметром возмущения  $\epsilon$ сог<br/>ласно

 $V_1 = 10\epsilon \text{ meV}, \quad V_2 = 100\epsilon \text{ meV}, \quad V_3 = 50\epsilon \text{ meV}.$ 

Найдите зависимости энергий состояний валентной зоны от  $\epsilon$  (a) точно, путем численной диагонализации гамильтониана 3 × 3 системы, и (б) приближенно с помощью разобранного метода, диагонализовав эффективный гамильтониан 2 × 2. Сравните результаты расчетов.

Ответ. Введем

$$E_1 = E_{hh1} - \frac{V_2^2}{E_g}, \quad E_2 = E_{lh1} - \frac{V_3^2}{E_g - E_{lh1}}, \quad V = V_1 - \frac{V_2 V_3}{2} \left(\frac{1}{E_g} + \frac{1}{E_g - E_{lh1}}\right)$$

где  $E_{lh1} = E_{hh1} - 30$  meV – энергетическое положение легкой дырки,  $E_{hh1} = 0$  – положение тяжелой дырки, принятое за начало отсчета энергии. Тогда собственные энергии эффективного гамильтониана 2×2 равны

$$E_{\pm} = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{E_1 - E_2}{2}\right)^2 + V^2}.$$
 (2.8)

Результаты расчетов представлены на рис. 2.3.



Рис. 2.3: Зависимости энергий уровней от параметра возмущения. Жирные красные кривые – точный численный расчет, тонкие розовые – диагонализация эффективного гамильтониана  $2 \times 2$ , синие штриховые кривые – диагонализация гамильтониана  $2 \times 2$  в пренебрежении смешиванием с зоной проводимости.

### 2.2 Метод эффективного гамильтониана

Мы сосредоточимся на исследовании спектра вблизи точки k = 0 – центра зоны Бриллюэна. Напомним, что электронная волновая функция – функция Блоха – записывается в виде

$$\psi_{n,\boldsymbol{k}} = \frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \qquad (2.9)$$

где  $u_{n,k}(\mathbf{r})$  – периодическая амплитуда,  $\mathcal{V}$  – нормировочный объем, и удовлетворяет одноэлектронному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = E_{n,\boldsymbol{k}}\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \qquad (2.10)$$

с периодическим потенциалом  $V(\mathbf{r})$ . Мы добавили в качестве нижнего индекса блоховской функции, амплитуды, а также энергии число n – номер зоны,  $\mathbf{k}$  – квазиволновой вектор.

Блоховские амплитуды  $u_{n,k=0}(\mathbf{r}) \equiv u_{n,0}(\mathbf{r})$  образуют полный набор (это доказывается в курсах физики твердого тела). Тогда произвольную блоховскую амплитуду можно разложить как

$$u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n'} C_{n'} u_{n',\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}).$$
(2.11)

Здесь  $C_{n'} \equiv C_{n'}(\mathbf{k}; n)$  – коэффициенты разложения, они зависят от номера интересующей нас зоны n, суммирование идет по всем зонам. Поэтому,

$$\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{n'} C_{n'} u_{n',\boldsymbol{0}}(\boldsymbol{r}). \qquad (2.12)$$

Введем столбец коэффициентов  $C_n$ 

$$\hat{C} \equiv \hat{C}(\boldsymbol{k}; n) = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ C_n \\ \dots \end{pmatrix}, \qquad (2.13)$$

и матрицу эффективного  $({m k}\cdot{m p})$  гамильтониана  $\hat{\mathcal{H}}\equiv \mathcal{H}({m k})$  с элементами

$$\mathcal{H}_{nn'} = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_{n'}(\mathbf{0})\right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}, \qquad (2.14)$$

где

$$\boldsymbol{p}_{nn'} = \frac{1}{v_0} \int_{v_0} d\boldsymbol{r} u_{n,\boldsymbol{0}}^*(\boldsymbol{r}) (-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}) u_{n',\boldsymbol{0}}$$
(2.15)

– матричные элементы оператора импульса в точке  $\mathbf{k} = 0$  (интегрирование ведется по объему элементарной ячейки  $v_0$ ). Тогда коэффициенты  $C_n(\mathbf{k})$  подчиняются матричной системе уравнений

$$\hat{\mathcal{H}}(\boldsymbol{k})\hat{C}(\boldsymbol{k}) = E(\boldsymbol{k})\hat{C}(\boldsymbol{k}).$$
(2.16)

Отметим, что в таком подходе индексы n, n' пробегают номера всех зон, в таком виде соответствующий эффективный гамильтониан (2.14) является точным.

Рассмотрим теперь несколько близких по энергии зон, а вклад далеких зон учтем по теории возмущений второго порядка (вклады более высоких порядков также можно получить, для этого используется метод унитарных преобразований, он описан в книге [1]). Согласно (2.6) соответствующий гамильтониан принимает вид

$$\tilde{\mathcal{H}}_{nn'} = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + E_{n'}(\mathbf{0})\right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} + \left(\frac{\hbar}{m_0}\right)^2 \sum_s \frac{(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p})_{ns} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{p})_{sn'}}{E_n(\mathbf{0}) - E_s(\mathbf{0})},$$
(2.17)

Здесь индексы  $n, n' \in 1, ..., N$  пробегают номера близких по энергии, интересующих нас зон, а индекс *s* нумерует все остальные далекие зоны. Отметим, что гамильтониан (2.17) допускает возможность вырождения близких зон ( $E_n = E'_n$ ).

При наличии внешних полей (плавно меняющихся в пространстве и во времени) согласно общей теории в (2.17) следует заменить  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - (e/c)\mathbf{A}$ , где  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал внешнего электромагнитного поля и добавить в гамильтониан потенциальную энергию электрона во внешнем поле  $U = e\varphi$ , где  $\varphi$  – скалярный потенциал. Напомним, что электрическое поле  $\mathbf{F}$  и магнитное поле  $\mathbf{B}$  связаны с потенциалами соотношениями

$$F = -\nabla \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}, \quad B = \nabla \times A.$$

Во многих случаях вид гамильтониана (2.17) можно установить из соображений симметрии.

### 2.3 Оператор координаты электрона в кристалле

Произвольную волновую функцию можно представить в виде суперпозиции блоховских функций (2.9) с коэффициентами разложения  $a_{n,k}$  (их временну́ю зависимость опускаем)

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} a_{n,\mathbf{k}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$
(2.18)

Напомним, что  $\sum_{k} \ldots = \mathcal{V}/(2\pi)^d \int d^d k \ldots (\mathcal{V}$  – соответствующий нормировочный объем).

Определим вид оператора координаты. Для этого запишем

$$\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} a_{n,\boldsymbol{k}} \boldsymbol{r}\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} a_{n,\boldsymbol{k}} \boldsymbol{r} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}).$$
(2.19)

Так как  $m{r}=-\mathrm{i}\partial e^{\mathrm{i}m{k}m{r}}/\partialm{k},$  то

$$\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} a_{n,\boldsymbol{k}}(-\mathrm{i}) \frac{u_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})}{\sqrt{\mathcal{V}}} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} = \sum_{n,\boldsymbol{k}} \frac{e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \mathrm{i} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} (a_{n,\boldsymbol{k}}u_{n,\boldsymbol{k}})$$
$$= \sum_{n,\boldsymbol{k}} \left[ \mathrm{i} \left( \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} a_{n,\boldsymbol{k}} \right) \psi_{n,\boldsymbol{k}} + a_{n,\boldsymbol{k}} \mathrm{i} \frac{e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}}{\sqrt{\mathcal{V}}} \frac{\partial u_{n,\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} \right].$$

Первый член в этой формуле вполне соответствует тому, что известно для свободного электрона, где в k-представлении  $r = i\partial/\partial k$ . Второй член описывает специфику кристалла. Поскольку производная от периодической амплитуды также является периодической функцией, запишем пользуясь полнотой блоховских амплитуд

$$\frac{\partial u_{n,\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} = -i \sum_{n'} \boldsymbol{\Omega}_{nn'}(\boldsymbol{k}) u_{n',\boldsymbol{k}}.$$
(2.20)

Здесь

$$\boldsymbol{\Omega}_{nn'}(\boldsymbol{k}) = \frac{\mathrm{i}}{v_0} \int_{v_0} d\boldsymbol{r} u^*_{n',\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \frac{\partial u_{n,\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}$$
(2.21)

– коэффициенты разложения (здесь, как и в (2.15), интегрирование ведется по объему элементарной ячейки). Тогда для  $r\psi_{n,k}(r)$  имеем

$$\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{n,\boldsymbol{k}} \left[ i \left( \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} a_{n,\boldsymbol{k}} \right) \psi_{n,\boldsymbol{k}} + a_{n,\boldsymbol{k}} \sum_{n'} \boldsymbol{\Omega}_{nn'}(\boldsymbol{k}) \psi_{n',\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \right].$$
(2.22)

Из (2.22) видно, что матричные элементы оператора координаты электрона в кристалле записывается как

$$\boldsymbol{r}_{nn'} = \delta_{nn'} i \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} + \boldsymbol{\Omega}_{nn'}(\boldsymbol{k}).$$
 (2.23)

Первое слагаемое в этой формуле диагонально по номеру зон, а второе – диагонально по k. В рамках топологического подхода к описанию зонной структуры величины  $\Omega_{nn'}(k)$  называют связностями Берри.

Задача. Получить выражение для оператора скорости электрона в кристалле.

Ответ:

$$oldsymbol{v}_{nn'}=rac{1}{\hbar}rac{\partial\mathcal{H}_{nn'}(oldsymbol{k})}{oldsymbol{k}}.$$

## Лекция 3

## Спин-орбитальное взаимодействие и модели зонной структуры

На этой лекции мы познакомимся с некоторыми основными моделями зонной структуры кристаллов. Для этого будет исследована роль спинорбитального взаимодействия в формировании блоховских состояний. Оказывается, что во многих системах спин-орбитальное взаимодействие играет ключевую роль в формировании энергетических зон. Изложенные модели будут использоваться далее в курсе для описания физических эффектов в низкоразмерных системах.

### 3.1 Спин-орбитальное взаимодействие

Во многих полупроводниках важную роль в формировании электронного спектра играет спин-орбитальное взаимодействие. В  $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$ -модели этот эффект описывается в рамках уравнения Шредингера-Паули, причем вклад в гамильтониан, описывающий спин-орбитальное взаимодействие, можно представить для свободного электрона в виде

$$-\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{p}],\tag{3.1}$$

где  $m_0$  – масса свободного электрона, c – скорость света в вакууме,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  вектор, составленный из матриц Паули (оператор спина электрона  $\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$ ):

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

 $F = -\nabla V(r)/e$  – электрическое поле, действующее на электрон, а V(r) – одноэлектронная потенциальная энергия в кристалле. Таким образом, блоховские функции удовлетворяют уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) - \frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma}[\boldsymbol{F}\times\boldsymbol{p}]\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = E_{n,\boldsymbol{k}}\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}), \quad (3.2)$$

ср. с (2.10). Здесь  $\psi_{n,k}$  – двухкомпонентный спинор. Отметим, что с учетом спин-орбитального взаимодействия при построении  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -модели следует заменить оператор импульса  $\mathbf{p} = -\mathrm{i}\hbar \nabla$  на оператор

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\nabla} V]. \tag{3.3}$$

Соответственно, в качестве возмущение выступает произведение  $(\hbar/m_0)\mathbf{k}\cdot\mathbf{\pi}$ , а в качестве блоховских амплитуд при  $\mathbf{k} = 0$  (или в другой точке зоны Бриллюэна, окрестность которой нас интересует) амплитуды, найденные с учетом спин-орбитального взаимодействия (3.1).

Классическим примером систем, где требуется учесть спин-орбитальную связь являются наиболее распространенных кубические полупроводники (Si, Ge, GaAs, InAs, InSb и т.п.), где состояния вершины валентной зоны формируются из атомных орбиталей *p*-типа. Соответствующие блоховские амплитуды мы будем обозначать  $\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z}$ . Для удобства вводится вектор  $\mathbf{R}$  с компонентами  $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$  и  $\mathcal{Z}$ . С учетом спина, но в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием состояния в центре зоны Бриллюэна шестикратно вырождены, соответствующие базисные функции запишем в виде  $\mathbf{R}_i | \uparrow \rangle = \alpha \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i | \downarrow \rangle = \beta \mathbf{R}_i \ (i = x, y, z)$ . Спиновые столбцы  $\alpha = | \uparrow \rangle, \beta = | \downarrow \rangle$ . Как хорошо известно из атомной физики шестикратное вырождение *p* состояний снимается при учете спин-орбитальной связи.

Расчет для электронов в полупроводниках довольно громоздкий (он приведен, например, в книгах [1, 3]). Оказывается, однако, что для полупроводников с решеткой алмаза и цинковой обманки структура уровней вполне аналогична структуре уровней для центрально-симметричного поля. Соответственно, в кубических полупроводниках гамильтониан спинорбитального взаимодействия, действующий на блоховские амплитуды  $\alpha \mathbf{R}_i, \beta \mathbf{R}_j,$  можно представить в виде

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{2\Delta}{3} (\boldsymbol{s} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}) = \frac{\Delta}{3} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}), \qquad (3.4)$$

где  $\Delta$  – некоторая константа, а оператор  $\hat{L}$  действует на функции  $\mathcal{X}$ ,  $\mathcal{Y}$  и  $\mathcal{Z}$  также как оператор орбитального момента на функции x, y и z. Как можно увидеть из непосредственной диагонализации гамильтониана (3.4) эта константа равна расщеплению состояний с различным значением полного момента.

Собственные функции вершины валентной зоны можно установить не прибегая к диагонализации гамильтониана (3.4). Действительно, нетрудно провести полную аналогию между состояниями вершины валентной зоны и состояниями частицы, описываемой орбитальным моментом L =1 и спиновым S = 1/2. При учете спин-орбитальной связи состояния системы должны характеризоваться полным моментом системы J = L + Sи его проекцией на данную ось, которую обозначим z. По правилу сложения моментов имеем четыре вырожденных состояния с полным моментом J = 3/2 и его проекцией на ось  $z J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$ . Эти состояния относятся к представлению  $\Gamma_8$  группы симметрии  $T_d$ .<sup>1</sup> Кроме этого, есть еще два вырожденных состояния, описываемых полным моментом J = 1/2 и его проекцией  $J_z = \pm 1/2$ . Эти состояния относятся к представлению  $\Gamma_7$ . Расщепление между квартетом и дублетом и есть константа  $\Delta$ .

Теперь легко записать волновые функции электрона в вершине валентной зоны. Как известно из квантовой механики

$$\Psi_{J,Jz} = \sum_{l_z,s_z} C^{JJ_z}_{ll_z,ss_z} \Psi^{(1)}_{ll_z} \Psi^{(2)}_{ss_z}.$$
(3.5)

Здесь функции  $\Psi_{ll_z}^{(1)}$  и  $\Psi_{ss_z}^{(2)}$  описывают орбитальную и спиновые части полной волновой функции, а  $C_{ll_z,ss_z}^{JJ_z}$  – коэффициенты Клебша-Гордана. В нашем случае спиновые функции есть столбцы  $\alpha = \Psi_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{(2)}$ ,  $\beta = \Psi_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{(2)}$ , а орбитальные функции соответствующие заданным проекциям момента

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Здесь и далее, если не оговорено особо представления обозначаются согласно книге George F. Koster, Robert G. Wheeler, John O. Dimmock, and Hermann Statz, *Properties of the thirty-two point groups*, MIT Press (1963) [4].

выбираются в виде (канонический базис):

$$\Psi_{1,1}^{(1)} = -\frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_{1,-1}^{(1)} = \frac{\mathcal{X} - i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_{1,0}^{(1)} = \mathcal{Z}.$$
 (3.6)

Удобные формулы для нахождения коэффициентов Клебша-Гордана есть в книге Д.А. Варшаловича, А.Н. Москалева, В.К. Херсонского, *Квантовая теория углового момента* [5], а значения коэффициентов есть во многих математических пакетах. Для нашего случая ненулевые коэффициенты  $C_{ll_z,ss_z}^{JJ_z}$ :

$$C_{1,1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} = 1, \quad C_{1,-1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} = 1, \quad (3.7)$$

$$C_{1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad C_{1,-1;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad C_{1,0;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\sqrt{3}}.$$

С использованием этих коэффициентов и общей формулы (3.5) можно получить явный вид блоховских амплитуд в Г-точке зоны Бриллюэна.

Строгий симметрийный анализ показывает, что в группе симметрии  $T_d$  тонкая структура состояний вершины валентной зоны в точности такая же, как получена выше из "наивных" соображений. Орбитальные функции преобразуются по представлению  $F_2$  (или  $\Gamma_{15}$ , в таблицах Костера –  $\Gamma_5$ ), а спиновые столбцы по  $\Gamma_6$ . Прямое произведение

$$\Gamma_{15} \times \Gamma_6 = \Gamma_7 + \Gamma_8.$$

### 3.2 Гамильтониан Латтинжера

Формализм углового момента удобно использовать и для исследования спектра дырок вблизи вершины валентной зоны. Сосредоточимся на случае, когда  $\Delta$  превосходит все остальные энергии в системе, тогда состояния  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$  можно рассматривать независимо. Особый интерес представляют четырехкратно вырожденные состояния  $\Gamma_8$ . Их эффективный гамильтониан можно построить, комбинируя компоненты волнового вектора  $\boldsymbol{k}$  и матрицы  $J_x, J_y, J_z$  [ $\boldsymbol{J} = (J_x, J_y, J_z)$ ] момента 3/2. Явный вид матриц  $J_{\alpha}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) и их произведений и степеней приведен в приложении.

В дальнейшем будем рассматривать сферически-симметричную модель. Тогда допустимы две инвариантные комбинации  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ и  $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{J})^2$ . Эффективный гамильтониан (гамильтониан Латтинжера в сферическом приближении) записывается в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right) + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} (\boldsymbol{kJ})^2, \qquad (3.8)$$

где  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  – параметры,  $m_0$  – масса свободного электрона. Можно переписать этот гамильтониан в виде, содержащем комбинации  $k_x^2 J_x^2 + \ldots$  и  $k_x k_y \{J_x, J_y\}_s + \ldots$ , чтобы сравнить с общим случаем, в котором учитывается гофрировка спектра валентной зоны, где  $\{A, B\}_s = (AB + BA)/2$ . Действительно, анализ показывает, что в группе симметрии  $T_d$  допустимы три вклада в эффективный гамильтониан:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2\right) + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} (k_x^2 J_x^2 + \ldots) + \frac{2\hbar^2 \gamma_3}{m_0} (k_x k_y \{J_x, J_y\}_s + \ldots).$$
(3.9)

Случай  $\gamma_2 = \gamma_3$  отвечает сферической симметрии.

Гамильтониан (3.8) исключительно удобно диагонализовать при k направленном по оси z (при этом матрица  $J_z$  диагональна). Легко увидеть, что есть две зоны, каждая из которых двукратно вырождена. Эти зоны характеризуются определенной спиральностью - проекцией полного момента на направление k:

$$E_{\rm hh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm hh}}, \quad \frac{m_0}{m_{\rm hh}} = \gamma_1 - 2|\gamma_2|$$
 — тяжелые дырки, спиральность  $\pm 3/2,$ 
(3.10)

$$E_{\rm lh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm lh}}, \quad \frac{m_0}{m_{\rm lh}} = \gamma_1 + 2|\gamma_2|$$
 — легкие дырки, спиральность  $\pm 1/2.$  (3.11)

Волновые функции суть столбцы, соответствующие заданной проекции  $J_z$ .<sup>2</sup> Для того, чтобы определить волновые функции при произвольном

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Уравнения (3.8), (3.10) и (3.11) приведены в электронном представлении. Считается, что  $\gamma_1 > 0$ , приведенная здесь классификация по проекции момента соответствует случаю  $\gamma_2 > 0$ .

направлении  $\boldsymbol{k}$  снова воспользуемся формализмом углового момента. Введем матрицу конечных вращений  $\mathcal{D}_{m\mu}^{(3/2)}(\varphi, \vartheta, \psi)$ , преобразующую блоховские амплитуды краев зон в системе координат, связанной с  $\boldsymbol{k}$ :  $u'_{\mu}$  $(\mu = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2)$ , в блоховские амплитуды лабораторной системы координат (связанной с кристаллографическими осями),  $u_{\mu}$ :

$$u'_{\mu} = \sum_{m} u_{m} \mathcal{D}_{m\mu}^{(3/2)}(\varphi, \vartheta, \psi).$$

Углы  $\varphi, \vartheta, \psi$  – углы Эйлера ( $\varphi, \vartheta$  – сферические углы вектора k в лабораторной системе). Удобно ввести  $\mathcal{D}_{m\mu}^{(J)}(\vartheta)$  согласно

$$\mathcal{D}_{m\mu}^{(J)}(\varphi,\vartheta,\psi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi} \mathcal{D}_{m\mu}^{(J)}(\vartheta) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu\psi}.$$

Матрицы  $\mathcal{D}_{m\mu}^{(J)}(\varphi, \vartheta, \psi)$ , называемые также *D*-функциями Вигнера приведены в [5]. Таким образом, компоненты волновой функции частицы с определенной спиральностью  $\mu$  при произвольном направлении **k** имеют вид

$$\chi_m^{(\mu)} = \mathcal{D}_{m\mu}^{(3/2)}(\varphi, \vartheta, \psi). \tag{3.12}$$

Гамильтониан Латтинжера в матричном виде с учетом гофрировки валентной зоны записывают в виде

$$\begin{bmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{bmatrix},$$
 (3.13)

где

$$F = (A - B)k_z^2 + \left(A + \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2),$$
  

$$G = (A + B)k_z^2 + \left(A - \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2),$$
  

$$I = -\frac{\sqrt{3}}{2}\left[B(k_x^2 - k_y^2) - 2i\frac{D}{\sqrt{3}}k_xk_y\right],$$
  

$$H = -Dk_z(k_x - ik_y).$$

Параметры A, B и D (отрицательные) связаны с константами  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  согласно

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1, \quad B = -\frac{\hbar^2}{m_0}\gamma_2, \quad D = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{m_0}\gamma_3.$$

Задача. Рассчитать дисперсию электронов в валентной зоне путем численной диагонализации гамильтониана (3.13) с параметрами GaAs:  $\gamma_1 = 6.98, \gamma_2 = 2.06, \gamma_3 = 2.93$ . Сравнить с результатами аналитического расчета по формулам (3.10), (3.11).

Дисперсия валентной зоны представлена на рис. 3.3



Рис. 3.1: Схематическая дисперсия тяжелых и легких дырок в сферическом приближении (левая панель), результаты расчета в рамках 14зонной модели с учетом гофрировки (правая панель), величины масс носителей заряда (в единицах массы свободного электрона  $m_0$ ) немного отличаются от общепринятых, например, в эксперименте  $m_e = 0.067m_0$ .

### 3.3 Модель Кейна

При исследовании многих явлений в полупроводниках типа GaAs, InAs и многих других удобно использовать модель, в которой  $k \cdot p$ -взаимодействие между состояниями зоны проводимости и валентной зоны учитывается точно. Вклады далеких зон можно принять во внимание пользуясь теорией возмущений, однако сейчас мы указанными эффектами пренебрежем. Рассмотрим для начала приближение, в котором спин-орбитальное расщепление валентной зоны несущественно. Поэтому спин мы не будем учитывать, а рассматриваемый базис блоховских состояний состоит из  $\mathcal{S}$  функции (дно зоны проводимости) и трех функций *p*-типа  $\mathcal{X}$ ,  $\mathcal{Y}$  и  $\mathcal{Z}$ , описывающих потолок валентной зоны.

В рамках  $\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p}$  теории возмущений эффективный гамильтониан зависит от двух параметров: ширины запрещенной зоны  $E_g$  и междузонного матричного элемента импульса:

$$\langle \mathcal{S}|p_x|\mathcal{X}\rangle = \langle \mathcal{S}|p_y|\mathcal{Y}\rangle = \langle \mathcal{S}|p_z|\mathcal{Z}\rangle = -\mathrm{i}P\frac{m_0}{\hbar},$$
 (3.14)

где *P* – вещественная константа (параметр Кейна). Отметим, что равенство указанных матричных элементов с точностью до фазовых множителей связано с требованиями симметрии, а выполнение соответствующих равенств (3.14) можно достичь выбором фаз волновых функций.

Гамильтониан системы можно записать в матричном виде как (порядок базисных функций таков: S, X, Y, Z)

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} 0 & -iPk_x & -iPk_y & -iPk_z \\ iPk_x & -E_g & 0 & 0 \\ iPk_y & 0 & -E_g & 0 \\ iPk_z & 0 & 0 & -E_g \end{bmatrix}.$$
 (3.15)

Диагональный вклад  $\hbar^2 k^2/(2m_0)$  опущен (его нужно учитывать наряду с вкладами далеких зон). Собственные состояния и закон дисперсии электронов и дырок легко определить при любом направлении  $\boldsymbol{k}$ , воспользовавшись сферической симметрией задачи. Направим волновой вектор по z, тогда состояния валентной зоны  $\mathcal{X}$  и  $\mathcal{Y}$  вообще не смешиваются с зоной проводимости, и их дисперсия есть константа

$$E_{v,1,2} = -E_g. (3.16)$$

Энергетические спектры зоны проводимости и валентной зоны, смешанных компонентой волнового вектора  $k_z$ , симметричны:

$$E_{c} = -\frac{E_{g}}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_{g}}{2}\right)^{2} + P^{2}k^{2}},$$

$$E_{v,3} = -\frac{E_{g}}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_{g}}{2}\right)^{2} + P^{2}k^{2}}.$$
(3.17)

Эта модель иногда называется двухзонной. Отметим, что учет членов  $\hbar^2 k^2/(2m_0)$  формально приводит к росту энергии вырожденных подзон

валентной зоны, ср. с уравнением (3.16), однако эти члены всегда одного порядка с опущенными здесь квадратичными по k вкладами от далеких зон. Поэтому в данной модели их учет есть превышение точности.

Задача: чему равна эффективная масса электрона на дне зоны проводимости в рамках рассматриваемой модели?

Oтвет:

$$m = \frac{\hbar^2 E_g}{2P^2}.$$

Удобно воспользоваться несколько иным представлением двухзонной модели. Запишем волновую функцию электрона в виде

$$\Psi = \mathfrak{u}S + \mathfrak{b}R, \tag{3.18}$$

где  $\mathbf{R} = (\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z})$  – вектор составленный из блоховских функций вершины валентной зоны,  $\mathbf{u}, \mathbf{v} = (\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y, \mathbf{v}_z)$  – коэффициенты. Уравнение Шредингера можно представить как

$$E\mathbf{u} = -\mathrm{i}P\mathbf{k}\mathbf{v},\tag{3.19a}$$

$$(E + E_a)\mathbf{v} = \mathrm{i}P\mathbf{k}\mathbf{u}.\tag{3.19b}$$

В модели Кейна учитывается спин и спин-орбитальное расщепление валентной зоны. Волновую функцию носителей заряда тогда записывают в форме, аналогичной (3.18):

$$\Psi = uS + \boldsymbol{vR},\tag{3.20}$$

где  $u = [u_{1/2}, u_{-1/2}]$  – спинор, а  $\boldsymbol{v} = [v_x, v_y, v_z]$  – вектор, составленный из спиноров. Уравнения на величины u и  $\boldsymbol{v}$  принимают вид

$$Eu = -iP kv, \qquad (3.21a)$$

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right) \boldsymbol{v} = iP\boldsymbol{k}\boldsymbol{u} + i\frac{\Delta}{3}\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v},$$
 (3.21b)

где мы воспользовались тем, что затравочная ширина запрещенной зоны,  $E'_g = E_g + \Delta/3$  (будет проверено ниже). Вид спин-орбитального члена можно установить из соображений симметрии ([ $\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}$ ] – вектор!), наличие множителя і связано с симметрией к обращению знака времени.

Аналитический расчет спектра и волновых функций в рамках модели Кейна со спин-орбитальным взаимодействием приведен ниже. Отметим,

что вид связи между  $\boldsymbol{v}$  и u в рамках данной модели можно установить из соображений симметрии в виде

$$\boldsymbol{v} = \mathrm{i} P A \boldsymbol{k} + P B [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}],$$

с неизвестными константами A и B, которые находятся в результате решения алгебраических уравнений.

Вычислительное задание: Построить гамильтониан  $8 \times 8$  в базисе функций  $S \uparrow, S \downarrow, X \uparrow, \ldots$ , пользуясь материалом лекций, рассчитать его спектр в математическом пакете (или запрограммировав на известном вам языке) и сравнить с формулой (3.27).

Результаты расчета энергетического спектра представлены на рис. 3.2.



Рис. 3.2: Спектр состояний в модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия ( $\Delta = E_g/3$ ).

## Спектр носителей заряда в модели Кейна с учетом спин-орбитального взаимодействия

Умножим уравнение (3.21b) векторно на  $\sigma$  и воспользуемся соотношением

$$\boldsymbol{\sigma} \times [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}] = -2\boldsymbol{v} + i\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}, \qquad (3.22)$$

которое легко установить покомпонентно:

$$[\boldsymbol{\sigma} \times [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}]]_x = \sigma_y [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}]_z - \sigma_z [\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}]_y = \sigma_y (\sigma_x v_y - \sigma_y v_x) - \sigma_z (\sigma_z v_x - \sigma_x v_z),$$

приняв во внимание, что

$$\sigma_x \sigma_y = \mathrm{i} \sigma_z, \ldots$$

Важно помнить, что применение известного правила '*bac-cab*' в данном случае необосновано, т.к. матрицы Паули не коммутируют между собой.

Из (3.21b) имеем

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right)\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v} = iP\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}\boldsymbol{u} - i\frac{2\Delta}{3}\boldsymbol{v} - \frac{\Delta}{3}\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}, \quad (3.23)$$

или

$$\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right)\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v} = iP\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}u - i\frac{2\Delta}{3}\boldsymbol{v}.$$
(3.24)

Умножим (3.21b) на  $E + E_g + 2\Delta/3$ :

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right) \left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) \boldsymbol{v}$$
$$= \mathrm{i}P\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) \boldsymbol{k}u + \mathrm{i}\frac{\Delta}{3}\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) \boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v},$$

и подставим  $\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{v}$  из уравнения (3.24). В результате имеем

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right) \left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) \boldsymbol{v}$$
  
=  $\mathrm{i}P\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) \boldsymbol{k}u + \mathrm{i}\frac{\Delta}{3}\left[\mathrm{i}P\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}u - \mathrm{i}\frac{2\Delta}{3}\boldsymbol{v}\right],$ 

или

$$\left[\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right)\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) - \frac{2\Delta^2}{9}\right]\boldsymbol{v}$$
$$= \mathrm{i}P\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right)\boldsymbol{k}u - \frac{\Delta}{3}P\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}u. \quad (3.25)$$

Несложно убедиться в том, что

$$\left(E + E_g + \frac{\Delta}{3}\right)\left(E + E_g + \frac{2\Delta}{3}\right) - \frac{2\Delta^2}{9} = (E + E_g)(E + E_g + \Delta),$$

а также

$$\frac{E+E_g+\frac{2\Delta}{3}}{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)} = \frac{1}{3} \left[ \frac{2}{E+E_g} + \frac{1}{E+E_g+\Delta} \right],$$
$$\frac{\Delta}{(E+E_g)(E+E_g+\Delta)} = \frac{1}{E+E_g} - \frac{1}{E+E_g+\Delta}.$$

Таким образом получаем для v:

$$\boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{i}P\boldsymbol{k}u}{3} \left[ \frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right] - P\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{k}u \left[ \frac{1}{E + E_g} - \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right].$$
(3.26)

Подстановка уравнения (3.26) в уравнение (3.21а) дает

$$Eu = \frac{P^2k^2}{3} \left[ \frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right] u.$$

Для спектра имеем

$$E(E + E_g)(E + E_g + \Delta) = P^2 k^2 \left( E + E_g + \frac{2}{3} \Delta \right).$$
 (3.27)

Поскольку в преобразованиях мы делили на  $E + E_g$ , то в спектре имеется еще одна двукратно вырожденная ветка (тяжелые дырки) с  $E = -E_g$ .

### 3.4 Модель Берневига-Хьюза-Жанга

Для двумерных систем модель развита в работе В. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang, Science **314**, 1757 (2006) [6]. Здесь мы изложим трехмерную версию этой модели, сформулированную в статье [7].

Рассмотрим объемный топологический изолятор,<sup>3</sup> например,  $Bi_2Se_3$ ,  $Bi_2Te_3$ , или  $Sb_2Te_3$ . Объемные кристаллы описываются точечной группой симметрии  $D_{3d}$ . Ось z выбрана вдоль оси третьего порядка.

Для описания объемного спектра (а на следующей лекции и краевых состояний) мы используем модель, которая учитывает объемные зоны симметрии  $\Gamma_4^{\pm}$ . Блоховские амплитуды зон обозначаем как  $\mathcal{Z}_{\pm} \uparrow, \mathcal{Z}_{\pm} \downarrow$ . Здесь знаки  $\pm$  обозначают четность по отношению к пространственной

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>О том, что это такое мы узнаем на одной из ближайших лекций.

инверсии, ↑, ↓ – спиновые столбцы. Минимальная модель зонной структуры описывается следующим гамильтонианом:

$$\mathcal{H}_{BHZ}(\mathbf{k}) = E_0(\mathbf{k})\mathcal{I} + \begin{pmatrix} M(\mathbf{k}) & A_1k_z & 0 & A_2k_- \\ A_1k_z & -M(\mathbf{k}) & A_2k_- & 0 \\ 0 & A_2k_+ & M(\mathbf{k}) & -A_1k_z \\ A_2k_+ & 0 & -A_1k_z & -M(\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$
 (3.28)

Здесь  $E_0(\mathbf{k}) = D_1 k_z^2 + D_2 k_\perp^2, \ k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2, \ \mathcal{I}$  – единичная матрица  $4 \times 4,$ 

$$M(\mathbf{k}) = M - B_1 k_z^2 - B_2 k_\perp^2, \qquad (3.29)$$

 $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$ . Волновой вектор  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ , энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны,  $E_g = 2|M|$ ,  $A_1, A_2, B_1, B_2, D_1, D_2$  – некоторые константы. Параметры  $A_1$ ,  $A_2$  описывают  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  взаимодействие зон  $\Gamma_4^{\pm}$  (зоны  $\mathcal{Z} \uparrow$  содержат примесь состояний  $2^{-1/2}(\mathcal{X} + i\mathcal{Y}) \downarrow$  и т.д.), остальные константы описывают вклады далеких зон. В матрице (4.3) порядок базисных функций таков:  $\mathcal{Z}_+ \uparrow$ ,  $\mathcal{Z}_- \uparrow$ ,  $\mathcal{Z}_+ \downarrow$ ,  $\mathcal{Z}_- \downarrow$ .<sup>4</sup>

При  $k_x = k_y = 0$  спектр

$$E(k_z) = \pm \sqrt{(M - B_1 k_z^2)^2 + A_1 k_z^2}.$$

Задача. Выразить через зонные параметры эффективные массы электронов и дырок.

Задача. Построить дисперсионные кривые для  $Bi_2Se_3$ , где параметры таковы: M = 0.28 eV,  $A_1 = 2.2$  eVÅ,  $A_2 = 4.1$  eVÅ,  $B_1 = 10$  eVÅ<sup>2</sup>,  $B_2 = 56.6$  eVÅ<sup>2</sup>,  $D_1 = 1.3$  eVÅ<sup>2</sup>,  $D_2 = 19.6$  eVÅ.

Ответ. Дисперсия показана на рис. 3.3

### 3.5 Модель Вейля

В ряде полуметаллов спектр описывается гамильтонианом Вейля

$$\mathcal{H}_W = \mathcal{I} A_\alpha k_\alpha + B_{\alpha\beta} \sigma_\alpha k_\beta. \tag{3.30}$$

Здесь  $\mathcal{I}$  – единичная матрица 2 × 2,  $A_i$  и  $B_{ij}$  – параметры,  $\alpha, \beta = x, y, z$  – декартовы индексы, k – квазиволновой вектор, отсчитываемый от точки

 $<sup>{}^{4}</sup>$ Функции  $\mathcal{X}, \mathcal{Y}$  и  $\mathcal{Z}$  преобразуются как соответствующие координаты.



Рис. 3.3: Дисперсия объемных состояний в топологическом изоляторе Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, рассчитанная в рамках гамильтониана (4.3). Левая панель показывает кристаллическую структуру системы.

Вейля (точки, в которой две зоны касаются), в (3.30) и далее подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Выражение для спектра

$$E(\mathbf{k}) = A_{\alpha}k_{\alpha} \pm \sqrt{\Lambda_{\alpha\beta}k_{\alpha}k_{\beta}}, \qquad (3.31)$$

где  $\hat{\Lambda} = \hat{B}^T \hat{B}$ . Из формулы (3.31) видно, что спектр представляет собой конус (как говорят, конус Вейля).

Вектор **A** описывает наклон (tilt) вейлевского конуса. Различают полуметаллы Вейля первого и второго типа. Упрощенная классификация приводится для матрицы  $B_{\alpha\beta} = B\delta_{\alpha\beta}$ . Тип I соответствует  $|\mathbf{A}| < |B|$ , а тип II – противоположному неравенству. В общем случае полуметалл Вейля относят к типу II, если имеется такое направление  $\mathbf{k}$ , что

$$\Lambda_{\alpha\beta}k_{\alpha}k_{\beta} < A_{\alpha}A_{\beta}k_{\alpha}k_{\beta}.$$

Примеры полуметаллов Вейля: TaAs, TaP, NbAs, NbP,  $Bi_{1-x}Sb_x$ .
### 3.6 Модель Дирака

Трехмерная изотропная система:

$$\mathcal{H}_{D} = \begin{pmatrix} E_{g}/2 & 0 & \hbar v k_{z} & \hbar v (k_{x} - ik_{y}) \\ 0 & E_{g}/2 & \hbar v (k_{x} + ik_{y}) & -\hbar v k_{z} \\ \hbar v k_{z} & \hbar v (k_{x} - ik_{y}) & -E_{g}/2 & 0 \\ \hbar v (k_{x} + ik_{y}) & -\hbar v k_{z} & 0 & -E_{g}/2 \end{pmatrix}.$$
 (3.32)

Здесь  $E_g$  – ширина запрещенной зоны, v – параметр, имеющий размерность скорости. Он связан с междузонным матричным элементом импульса как  $v = p_{cv}/m_0$ . Соответствующий эффективный гамильтониан лишь обозначениями отличается от гамильтониана, представляющего уравнение Дирака в релятивистской физике. Отметим, что унитарным преобразованием гамильтониан (3.32) можно свести к сферическисимметричной версии гамильтониана Берневига-Хьюза-Жанга (4.3) в пренебрежении квадратичными по k членами.

В двумерной системе гамильтониан в модели Дирака имеет простой вид

$$\mathcal{H}_D = \frac{E_g}{2} \sigma_z + \hbar v \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{k}. \tag{3.33}$$

Здесь  $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$  волновой вектор в плоскости. Для графена  $E_g = 0$ ,  $v \approx c/300$ .

## Лекция 4

# Поверхностные и краевые состояния в топологических изоляторах

На этой лекции мы познакомимся с топологическими изоляторами, на поверхности которых формируются проводящие состояния. В таких системах естественным образом формируются низкоразмерные электронные состояния.

Хорошо известно, что на поверхности многих кристаллов возникают локализованные электронные состояния. Развиты модели Тамма и Шокли для описания таких состояний. Как правило, эти состояния чувствительны к характеру поверхности: ее кристаллографической ориентации, пассивации химических связей, наличию или отсутствию адатомов на поверхности. Также бывают локализованные состояния вблизи границы в структурах металл-диэлектрик-полупроводник.

Однако есть ряд систем, где поверхностные состояния формируются благодаря только объемным свойствам кристалла. В этом случае поверхностные состояния не чувствительны к характеру поверхности. Такие системы называют топологическими изоляторами.

**О.** Топологический изолятор – кристалл, объем которого является изолятором (имеется ненулевая запрещенная зона), а поверхность проводит электрический ток, независимо от ее характера. Наличие проводящих состояний, как говорят, защищено топологическими свойствами системы: ее симметрией к обращению хода времени и законом сохранения числа частиц.

#### 4.1 Плавный гетеропереход

Для начала решим вспомогательную задачу. Пусть есть гетеропереход, описываемый гамильтонианом

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{E_g(z)}{2} & Pk_z\\ Pk_z & -\frac{E_g(z)}{2} \end{pmatrix},\tag{4.1}$$

где P – константа, а  $E_g(z)$  – плавная функция координаты, нечетная по отношению к  $z \to -z$ . Пусть при  $z \to +\infty$  ширина запрещенной зоны  $E_g = \Delta > 0$ , а при  $z \to -\infty$   $E_g = -\Delta < 0$ . Покажем, что в такой системе есть связанное состояние с энергией E = 0, это состояние локализовано в окрестности z = 0, т.е. точки, где  $E_g$  меняет знак.

Будем искать собственный столбец в виде

$$\hat{\psi}(z) = \begin{pmatrix} \varphi_1(z) \\ \varphi_2(z) \end{pmatrix}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( |\varphi_1(z)|^2 + |\varphi_2(z)|^2 \right) = 1.$$

Легко проверить, что при E = 0

$$\varphi_2(z) = \mathrm{i}\varphi_1(z),$$

поэтому получаем уравнение на одну из огибающих

$$\frac{E_g(z)}{2}\varphi_1(z) + P\varphi_1'(z) = 0.$$
(4.2)

Это уравнение тривиально решается

$$\varphi_1(z) = A \exp\left(-\frac{1}{2P} \int_0^z E_g(z') dz'\right) \to A e^{-\frac{\Delta|z|}{2P}}, \quad z \to \pm \infty,$$

постоянную А находим из условия нормировки

$$|A|^{2} = \left[2\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2P}\int_{0}^{z} E_{g}(z')dz'\right)dz\right]^{-1}.$$

Таким образом, на границе сред с разными знаками  $E_g$  образуется локализованное состояние. Зависимость  $E_g(z)$  существенной роли не играет. Наличие такого интерфейсного состояния имеет глубокую физическую природу, связанную с топологическими свойствами зон. Можно сказать, что знак  $E_g$ ,  $C = \text{sign } E_g$ , является топологическим инвариантом. Он отличает системы с нормальным C = +1 > 0 и инвертированным C = -1 < 0 энергетическим спектром.<sup>1</sup> Поскольку дискретный параметр не может плавным образом изменить свое значение, то на границе сред с разным значением C должно произойти качественное изменение свойств. В данном случае формируется локализованное вблизи точки  $E_g = 0$  состояние.

## 4.2 Состояния на поверхности объемного топологического изолятора

Исследуем формирование "топологически-защищенных" поверхностных состояний. Пусть топологический изолятор занимает полупространство z > 0. Для простоты мы будем использовать "симметричную" модель, введенную на прошлой лекции, в которой  $E_0(\mathbf{k}) = 0$ :

$$\mathcal{H}_{b}(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} M(\boldsymbol{k}) & A_{1}k_{z} & 0 & A_{2}k_{-} \\ A_{1}k_{z} & -M(\boldsymbol{k}) & A_{2}k_{-} & 0 \\ 0 & A_{2}k_{+} & M(\boldsymbol{k}) & -A_{1}k_{z} \\ A_{2}k_{+} & 0 & -A_{1}k_{z} & -M(\boldsymbol{k}) \end{pmatrix}, \quad M(\boldsymbol{k}) = M - B_{1}k_{z}^{2} - B_{2}k_{\perp}^{2},$$

$$(4.3)$$

где  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2, \ k_{\pm} = k_x \pm i k_y.$ 

Положим сначала  $\mathbf{k}_{\perp} = 0$ . Объемный гамильтониан  $\mathcal{H}_b$  разобъется на два блока, связанных симметрией к обращению хода времени. Четырехкомпонентный столбец  $\Psi$  для поверхностных состояний можно представить в виде

$$\Psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

где введены двухкомпонентные функции

$$\psi_{\uparrow} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \varphi(z), \quad \psi_{\downarrow} = \begin{pmatrix} -a \\ b \end{pmatrix} \varphi(z).$$
(4.5)

 $<sup>^1</sup> Аналогия с топологией такова: число <math display="inline">{\cal C}$ аналогично роду поверхности – числу, характерирующему количество "ручек" поверхности и различающему, например, сферу и тор.

Комплексные коэффициенты <br/> a,bсвязаны условием номировки  $|a|^2+|b|^2=1,$ а плавная огибающая функция

$$\varphi(z) = \left| \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \right|^{1/2} (e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}).$$
(4.6)

Эта функция удовлетворяет граничным условиям  $\Psi(0) = 0$  (простейший вариант) и  $\Psi(z \to \infty) \to 0$ , поэтому  $\lambda_1, \lambda_2 < 0$ . Подчеркнем, что поверхностные состояния будут и при любом другом физичном граничном условии.

Энергию E и параметры  $\lambda_1, \lambda_2$  (а также коэффициенты a и b) поверхностных состояний определим, поставив(4.5) в Eq. (4.3) и заменив  $k_z$  на  $-i\partial/\partial z$ . На a и b получим систему из двух уравнений

$$(M + B_1\lambda^2)a - iA_1\lambda b = Ea, (4.7a)$$

$$-(M+B_1\lambda^2)b - iA_1\lambda a = Eb, \qquad (4.7b)$$

где  $\lambda = \lambda_1$  или  $\lambda_2$ , причем *a* и *b* должны быть одними и теми же (так как  $\varphi(z)$  фиксирована. Поэтому

$$\frac{a}{b}\Big|_{\lambda=\lambda_1} = \frac{\mathrm{i}A_1\lambda_1}{M+B_1\lambda_1^2 - E} = \frac{\mathrm{i}A_1\lambda_2}{M+B_1\lambda_2^2 - E} = \left.\frac{a}{b}\right|_{\lambda=\lambda_2}.\tag{4.8}$$

Кроме того, приравнивая определитель (4.7) к нулю получаем второе уравнение, связывающее  $\lambda_{1,2}$  и E:

$$\left[ (M + B_1 \lambda^2) - E \right] \left[ (M + B_1 \lambda^2) + E \right] = A_1^2 \lambda^2.$$
(4.9)

Из системы (4.8), (4.9) получаем, что E = 0 (это можно увидеть и из соображений симметрии), а также возможные значения  $\lambda_{1,2}$ :

$$\lambda_{1,2} = \frac{-A_1 \pm \sqrt{A_1^2 - 4B_1 M}}{2B_1}.$$
(4.10)

Здесь считается, что  $A_1 > 0$  и  $B_1 > 0$  (решение аналогично для отрицательного  $A_1$  и/или  $B_1$ ). Видно, что одновременно  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  могут быть отрицательными лишь при условии, что

$$MB_1 > 0.$$
 (4.11)



Рис. 4.1: Дисперсия поверхностных состояний.

Это условие называют условием инверсии зон (в данном случае по отношению к вакууму).

Воспользовавшись формулой (4.8) получаем, что  $a = -i/\sqrt{2}$  и  $b = 1/\sqrt{2}$ . Поэтому волновые функции двух (вырожденных при  $k_{\perp} = 0$ ) поверхностных состояний имеют вид

$$\Psi_{\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\mathbf{i} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \varphi(z), \quad \Psi_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{i} \\ 1 \end{pmatrix} \varphi(z). \tag{4.12}$$

Эффективный гамильтониан  $2 \times 2$  поверхностных состояний получается проектированием объемного гамильтониана (4.3) на состояния (4.12):

$$\mathcal{H}_s(\boldsymbol{k}) = A_2(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \qquad (4.13)$$

где  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  – двурядные матрицы Паули. Говорят, что такой гамильтониан описывает безмассовые "дираковские" состояния (или состояния, аналогичные состояниям двумерных нейтрино в модели Вейля).

Задача. Для параметров M = 0.28 eV,  $A_1 = 2.2$  eVÅ,  $A_2 = 4.1$  eVÅ,  $B_1 = 10$  eVÅ<sup>2</sup> оценить длины локализации  $1/\lambda_1$ ,  $1/\lambda_2$ .

Задача. Для тех же параметров оценить оценить эффективную скорость состояний  $A_2/\hbar$ .

Дисперсия поверхностных состояний (дираковский конус), рассчитанная в симметричной модели, показана на рис. 4.1.

### 4.3 Краевые состояния в двумерных системах

Эта же модель может быть применена с минимальными изменениями к одномерным состояниям на краях двумерных топологических изоляторов, например, систем HgTe/CdHgTe. При толщинах квантовой ямы  $d > d_{\rm cr} \approx 6.3$  Å в яме имеется инверсия зон, а на одномерных границах ямы формируются краевые состояния, описываемые аналогичными огибающими и с аналогичным (но одномерным) дираковским гамильтонианом:

$$\mathcal{H}_s(\boldsymbol{k}) = \hbar v \sigma_x k_v, \tag{4.14}$$

где считается, что край ориентирован вдоль оси y (выбор матрицы  $\sigma_x$  весьма условен).

Еще одним интересным случаем возникновения топологических краевых состояний является двумерный электронный газ в перпендикулярном магнитном поле, когда реализуется целочисленный квантовый эффект Холла. Здесь за счет магнитного поля электронные состояния вдоль края двигаются в определенную сторону (направление движение определяется ориентацией края и направлением магнитного поля), в то время как для гамильтониана (4.14) (спин-орбитальное взаимодействие) есть два состояния с противоположными спинами, распространяющиеся в противоположные стороны. Про это речь пойдет на соответствующей лекции далее в нашем курсе.

## 4.4 Числа Черна и топологические инварианты

Отметим, что и в случае объемного топологического изолятора, и в случае двумерного, условием инверсии зон является, среди прочего, сильное спин-орбитальное взаимодействие. Качественно, возникновение краевых (поверхностных) состояний можно понять из следующих аргументов: на границе двух материалов с прямым и инвертированным спектром  $(E_g > 0$  и  $E_g < 0$ ) по соображениям непрерывности энергетическая щель должна закрыться, поэтому будет поверхностное состояние.

В рамках топологического подхода каждой зоне можно сопоставить некоторое целое число – число Черна. Проиллюстрируем это для дву-

мерной системы. Напомним, что согласно лекции 2 [см. формулу (2.23)] оператор координаты электрона в кристалле содержит вклад, связанный с блоховскими амплитудам (связность Берри, Berry connection):

$$\boldsymbol{\Omega}_{nn'}(\boldsymbol{k}) = \frac{\mathrm{i}}{v_0} \int_{v_0} d\boldsymbol{r} u_{n',\boldsymbol{k}}^*(\boldsymbol{r}) \frac{\partial u_{n,\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}$$
(4.15)

Введем кривизну Берри как

$$\mathcal{F}_{z}^{(n)}(\boldsymbol{k}) = [\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_{nn}(\boldsymbol{k})]_{z} = \frac{\partial \Omega_{nn,y}(\boldsymbol{k})}{\partial k_{x}} - \frac{\partial \Omega_{nn,x}(\boldsymbol{k})}{\partial k_{y}}, \quad (4.16)$$

и определим число Черна согласно (интегрирование ведется по двумерной зоне Бриллюэна)<sup>2</sup>

$$\mathcal{C}_n = -\frac{1}{2\pi} \int_{\mathrm{BZ}} d^2 k \mathcal{F}_z^{(n)}(\boldsymbol{k}).$$
(4.17)

Имеет место аналог теоремы Гаусса-Бонне: величина  $C_n$  – целое число. Запрещенной зоне между зонами n и n-1 соответствует топологический инвариант  $C_n - C_{n-1}$ . Соответственно, если в двух граничащих материалах соответствующие инварианты для запрещенных зон различны, то на границе будут формироваться одномерные краевые каналы. Соответствующая теорема описывает соответствие между объемными характеристиками кристалла (числа  $C_n$ ) и их поверхностными свойствами (в англоязычной литературе: *bulk boundary correspondence*).

Отметим, что изменение параметров гамильтониана (не приводящее к закрытию щели, т.е. не приводящее к нарушению порядка зон) не меняет чисел Черна и топологических инвариантов, соответствующих запрещенным зонам. Это обеспечивает топологическую защиту краевых и поверхностных состояний.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Это – наводящие соображения. Более строго математическая сторона вопроса описана в книге В. А. Bernevig, Т. L. Hughes, "Topological insulators and topological superconductor", Princeton University Press (2013) [8].

## Лекция 5

## Размерное квантование и граничные условия для плавных огибающих

Перейдем теперь к изучению эффекта размерного квантования – основного эффекта в физике низкоразмерных структур. Мы обсудим граничные условия на гетероинтерфейсах в рамках метода эффективной массы и разберем простейшие примеры систем различной размерности, где имеет место эффект размерного квантования.

#### 5.1 Граничные условия

При описании физических явлений в низкоразмерных структурах: квантовых ямах, квантовых проволоках и квантовых точках одной из ключевых проблем является сшивка волновых функций на гетерограницах.

Рассмотрим для примера структуру с квантовой ямой из материала А, окруженную материалом В. Состояния электрона будем описывать в рамках простой зоны, спином пренебрежем. Волновая функция электрона в яме и в барьерах описывается гамильтонианом эффективной массы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A}\frac{d^2}{dz^2}\varphi(z) = E\varphi(z), \qquad (5.1a)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B}\frac{d^2}{dz^2}\varphi(z) + V_B\varphi(z) = E\varphi(z).$$
(5.1b)

Здесь  $\varphi(z)$  – плавная огибающая,  $m_A$  и  $m_B$  – эффективные массы электрона в яме и в барьере,  $V_B$  – высота барьера, энергия отсчитывается от дна зоны проводимости в яме. Считаем, что волновой вектор в плоскости интерфейсов равен нулю.

Граничные условия, связывающие значения волновой функции и ее производной на интерфейсе слева и справа, можно записать в общем виде

$$\varphi|_{A} = t_{11}\varphi|_{B} + t_{12}m_{B}^{-1}\varphi'|_{B}$$

$$m_{A}^{-1}\varphi'|_{A} = t_{21}\varphi|_{B} + t_{22}m_{B}^{-1}\varphi'|_{B},$$
(5.2)

где штрих обозначает дифференцирование по z, множители  $1/m_A$ ,  $1/m_B$  введены для удобства, А и В обозначают значения слева и справа от гетероинтерфейса (в слоях А и В, соответственно), а  $t_{ij}$  – некоторые коэффициенты, зависящие от микроскопических свойств границы. Матрица коэффициентов  $\hat{t}$  с элементами  $t_{ij}$  называют матрицей переноса через интерфейс, но подробнее об этом – на следующей лекции. На коэффициенты в (5.2) накладывается требование сохранения потока частиц. По определению, поток в слое А

$$J = -i\frac{\hbar}{2m_A} \left[ \varphi^* \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} - \psi \left( \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} \right)^* \right]_A = \frac{\hbar}{m_A} \operatorname{Im} \left[ \varphi^* \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} \right]_A$$

Аналогичным выражением описывается поток в слое В. Воспользуемся условием (5.2), чтобы установить связь между коэффициентами:

$$\operatorname{Im}\{t_{11}^*t_{21}\}|\varphi|^2 + \operatorname{Im}\{t_{12}^*t_{22}\}|\dot{\varphi}|^2 + \operatorname{Im}\{t_{11}^*t_{22}\varphi^*\dot{\varphi} + t_{12}^*t_{21}\dot{\varphi}^*\varphi\} = \operatorname{Im}\{\varphi^*\dot{\varphi}\}.$$
(5.3)

Здесь введено обозначение  $\dot{\varphi} = m^{-1} \varphi'$ . Величины  $\varphi$  и  $\dot{\varphi}$  можно считать независимыми, поэтому подставим в уравнение (5.3) последовательно  $\dot{\varphi} = 0, \varphi = 0, \varphi^* \dot{\varphi}$  – вещественное:

$$\operatorname{Im}\{t_{11}^*t_{21}\} = 0, \quad \operatorname{Im}\{t_{12}^*t_{22}\} = 0, \quad \operatorname{Im}\{t_{11}^*t_{22} + t_{12}^*t_{21}\} = 0.$$

Из этих требований следует, что (с точностью до общей фазы) все коэффициенты  $t_{11}, t_{12}, t_{21}, t_{22}$  – вещественны. Тогда поставив  $\varphi^* \dot{\varphi}$  чисто мнимым получим окончательно

$$\det \hat{t} = t_{11}t_{22} - t_{12}t_{21} = 1. \tag{5.4}$$

Микроскопические расчеты показывают, что, как правило, произведение  $t_{12}t_{21}$  (для электронов в зоне проводимости) мало и условие сводится к  $t_{11}t_{22} = 1$ .

Простейшим частным случаем таких граничных условий являются условия Бастарда ( $t_{11} = t_{22} = 1, t_{12} = t_{21} = 0$ ):

$$\varphi|_A = \varphi|_B$$

$$m_A^{-1}\varphi'|_A = m_B^{-1}\varphi'|_B,$$
(5.5)

т.е. требуется непрерывность функции и её производной с множителем 1/m. В связи с этим возникает *задача:* как изменятся условия (5.5) с учетом непараболичности спектра? Получить ответ в рамках модели Кейна без учета спин-орбитального взаимодействия.

Решение. Уравнения модели Кейна:

$$E\mathbf{u} = -\mathrm{i}P\mathbf{k}\mathbf{v},\tag{5.6a}$$

$$(E + E_q)\mathbf{b} = \mathrm{i}P\mathbf{k}\mathbf{u}.\tag{5.6b}$$

Пусть плоскость интерфейса – z = 0. Потребуем непрерывности **и** и P**b** на интерфейсе. Из (5.6b) имеем

$$\mathbf{\mathfrak{v}} = \frac{P}{E + E_g} \mathbf{\mathfrak{u}}' \Rightarrow \left. \frac{P^2}{E + E_g} \mathbf{\mathfrak{u}}' \right|_A = \left. \frac{P^2}{E + E_g} \mathbf{\mathfrak{u}}' \right|_B.$$

Запишем в рамках модели Кейна дисперсию электрона в виде

$$E = \frac{P^2 k^2}{E + E_g}$$
 или  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m(E)},$ 

тогда граничное условие на производную и принимает вид

$$\frac{1}{m(E)}\mathfrak{u}'\Big|_{A} = \frac{1}{m(E)}\mathfrak{u}'\Big|_{B}.$$
(5.7)

Задача на дом. Обобщить этот вывод с учетом спин-орбитального взаимодействия.

Размерное квантование и граничные условия для плавных огибающих47

#### 5.2 Структуры с квантовыми ямами

Мы начнем с простейшей модели структуры с квантовой ямой, в которой барьеры считаются бесконечно высокими. Плавная огибающая волновой функции может быть представлена в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i(k_x x + k_y y)} \varphi(z) , \qquad (5.8)$$

где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  - двумерный волновой вектор, характеризующий движение электрона в плоскости интерфейса. В структуре с барьерами из материала В, охватывающими яму из материала А, функция  $\varphi(z)$  удовлетворяет одномерному уравнению Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A}\frac{d^2}{dz^2}\,\varphi(z) = E_z\,\varphi(z)\,,$$

где  $m_A$  - эффективная масса электрона в материале А. Вне слоя А функция  $\varphi(z)$  равна тождественно нулю. Полная энергия электрона E складывается из энергии размерного квантования  $E_z$  и кинетической энергии  $E_{xy} = \hbar^2 k^2 / 2m_A$  (значения E отсчитываются от дна зоны проводимости материала А). Начало отсчета на оси z выбирается в середине слоя А. Тогда граничные условия для  $\varphi$  в приближении бесконечно высоких барьеров записываются в виде

$$\varphi\left(\pm\frac{a}{2}\right) = 0 \; ,$$

где a - ширина слоя A и, следовательно,  $\pm a/2$  - координаты интерфейсов. Система обладает симметрией к отражению  $z \rightarrow -z$ . Поэтому совокупность решений уравнения Шредингера разбивается на четные и нечетные:

$$C\cos k_z z$$
 и  $C\sin k_z z$ ,

где  $k_z = \sqrt{2m_A E_z/\hbar^2}, C$  - нормировочный коэффициент. С учетом граничных условий получаем

$$k_z = \frac{\nu\pi}{a} , \ E_z = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left(\frac{\nu\pi}{a}\right)^2 , \qquad (5.9)$$

где  $\nu = 1, 3, ...$  для четных и  $\nu = 2, 4, ...$  для нечетных решений. Соответствующие размерно-квантованные электронные или дырочные состояния будем обозначать в виде  $e\nu$  или  $h\nu$  соответственно. Энергетический

спектр состоит из ветвей

$$E_{e\nu q} = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[ \left( \frac{\nu \pi}{a} \right)^2 + k^2 \right] \;,$$

называемых подзонами размерного квантования, или просто подзонами.

Барьеры конечной высоты,  $k_x = k_y = 0$ . При конечной высоте барьеров огибающая  $\varphi$  отлична от нуля в слоях В и удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_B}\frac{d^2}{dz^2}+V\right)\varphi(z)=E_z\,\varphi(z)\,,$$

где потенциальный барьер V равен разрыву  $\Delta E_c$  зоны проводимости на интерфейсе. Как уже упоминалось, наиболее распространенными являются граничные условия Бастарда (5.5)

$$\varphi|_A = \varphi|_B , \ \frac{1}{m_A} \left(\frac{d\varphi}{dz}\right)_A = \frac{1}{m_B} \left(\frac{d\varphi}{dz}\right)_B , \qquad (5.10)$$

где  $\varphi_{A,B}$  - значение огибающей на интерфейсе со стороны слоя A или B. Четное решение записывается в виде

$$\varphi(z) = \begin{cases} C \, \cos k_z z, & \text{при } |z| \le \frac{a}{2} ,\\ D \, \exp\left[-\varpi(|z| - \frac{a}{2})\right], & \text{при } |z| \ge \frac{a}{2} , \end{cases}$$
(5.11)

где æ =  $[2m_B(V - E_z)/\hbar^2]^{1/2}$ , V - высота барьера и учтено, что для размерно-квантованных состояний энергия  $E_z$  меньше V и волновой вектор в слоях В мнимый:  $k_B = i$ æ. Из системы уравнений (5.5), которую можно записать с учетом (5.11) как

$$C \cos \frac{k_z a}{2} = D, \quad -\frac{k}{m_A} C \sin \frac{k_z a}{2} = -\frac{x}{m_B} D,$$
 (5.12)

получаем трансцендентное уравнение для энергии четных состояний

$$\tan\frac{k_z a}{2} = \eta \equiv \frac{m_A}{m_B} \frac{\alpha}{k_z} \,. \tag{5.13}$$

Аналогичное уравнение для нечетных решений имеет вид

$$\operatorname{ctg} \frac{k_z a}{2} = -\eta \,. \tag{5.14}$$

Приведенные выше формулы применимы и при отличном от нуля волновом векторе  $\boldsymbol{k}$ , если под  $k_z$  и  $\approx$  понимать величины

$$k_z = \left(\frac{2m_A E}{\hbar^2} - k^2\right)^{1/2}, \quad \mathfrak{x} = \left[\frac{2m_B(V-E)}{\hbar^2} + k^2\right]^{1/2}.$$

Известно, что в симметричной одномерной потенциальной яме всегда имеется хотя бы одно размерно-квантованное состояние. Поэтому при конечной высоте барьеров энергетический спектр электрона состоит из конечного числа подзон размерного квантования  $e\nu$  и континуума [состояния с  $E - (\hbar^2 k^2 / 2m_B) > V$ ]. При совпадающих эффективных массах  $m_A$  и  $m_B$  зависимость  $E_{e\nu k}$  от k параболическая, как в однородных материалах.

Особенности размерного квантования в многозонной модели. Проиллюстрируем специфику задачи на простейшей двухзонной модели с гамильтонианом (ср. с (4.1))

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{E_g(z)}{2} & Pk_z \\ Pk_z & -\frac{E_g(z)}{2} \end{pmatrix},\tag{5.15}$$

где при -a/2 < z < a/2  $E_g(z) = E_{g,0}$  (ширина запрещенной зоны в материале ямы), а при |z| > a/2 ширина запрещенной зоны бесконечно велика (модель бесконечно высокого барьера). Поскольку компоненты плавной огибающей связаны операцией дифференцирования, то в такой модели корректно описать размерное квантование не удается: пусть в зоне проводимости решение выбрано в виде  $\propto \cos(\pi z/a)$  (эта огибающая обнуляется при  $z = \pm a/2$ ), то в валентной зоне решение будет  $\propto \sin(\pi z/a)$ , и не обратится в нуль на интерфейсах.

Если учесть конечную высоту барьера V, то при достаточно высоком барьере огибающие будут существенно изменяться на малой длине  $l \sim P/V$ , которая при типичных параметрах оказывается сопоставимой с постоянной решетки.

Гамильтониан (5.15) можно дополнить квадратичными по  $k_z$  диагональными членами, связанными со вкладами далеких зон и дисперсией свободного электрона. При этом граничным условиям удовлетворить можно, однако среди решений могут возникать так называемые фиктиеные (spurious) решения, плавные огибающие функции которых оказываются не плавными (их пространственный масштаб изменения оказывается сопоставим с постоянной решетки). Исключение таких решений оказывается непростой задачей, см., например, работу [9]. Размерное квантование и граничные условия для плавных огибающих 50

#### 5.3 Квантовые проволоки и квантовые точки

В квантовой яме носитель может свободно перемещаться в двух измерениях. Поэтому о структуре с квантовой ямой говорят как о двумерной системе или о квазидвумерной системе, в последнем случае имея ввиду, что размерно-квантованные состояния имеют конечную протяженность и в третьем направлении, т.е. в направлении оси роста. Рассмотрим теперь кратко квантование электронных состояний в квантовых проволоках (система размерности d = 1) и квантовых точках (d = 0), в которых свободное движение возможно только в одном направлении или вообще отсутствует.

Проволоки с прямоугольным сечением  $a_x \times a_y$ , бесконечно высокие барьеры. Огибающая волновой функции электрона имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{\mathcal{L}}} \varphi(x, y) , \ \varphi(x, y) = \varphi_{\nu_x}(x, a_x) \ \varphi_{\nu_y}(y, a_y)$$

где  $\mathcal{L}$  – нормировочная длина проволоки,  $k_z$  - волновой вектор, характеризующий свободное движение вдоль главной оси проволоки,

$$\varphi_{\nu}(x,a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos\frac{\nu x}{a} & \text{при нечетном } \nu ,\\ \sin\frac{\nu x}{a} & \text{при четном } \nu . \end{cases}$$
(5.16)

Для энергии электрона в подзоне  $e\nu_x\nu_y$  получаем

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_A} \left[ k_z^2 + \left(\frac{\nu_x \pi}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{\nu_y \pi}{a_y}\right)^2 \right] \,. \tag{5.17}$$

Цилиндрические квантовые проволоки, барьеры конечной высоты, основное состояние ( $k_z = 0$ ). В этом случае огибающая выражается через функции Бесселя  $J_0(x)$  и  $K_0(x)$ :

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} C J_0(k\rho) \text{ при } r \le R, \\ D K_0(\varpi\rho) \text{ при } r \ge R, \end{cases}$$
(5.18)

где  $D = C J_0(kR) / K_0(aR).$ 

Квантовые точки в форме прямоугольного параллелепипеда  $a_x \times a_y \times a_z$ , бесконечно высокие барьеры. Приведем выражения для огибающей волновой функции и энергии электрона

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi_{\nu_x}(x, a_x)\varphi_{\nu_y}(y, a_y)\varphi_{\nu_z}(z, a_z) , \ E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_A} \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{\nu_j}{a_j}\right)^2 .$$
(5.19)

Сферические квантовые точки радиуса R, барьеры конечной высоты, основное состояние. Основное состояние обладает сферической симметрией:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{C}{r} \begin{cases} \sin kr & \text{при } r \le R ,\\ \sin kR e^{-\mathfrak{x}(r-R)} \text{ при } r \ge R , \end{cases}$$
(5.20)

где С – нормировочный коэффициент,

$$k = (2m_A E/\hbar^2)^{1/2},$$
  $\mathfrak{x} = [2m_B (V - E)/\hbar^2]^{1/2}.$  (5.21)

Энергия размерного квантования Е удовлетворяет уравнению

$$1 - kR \operatorname{ctg} kR = \frac{m_A}{m_B} (1 + \alpha R) \,.$$

## 5.4 Локализация электронов на флуктуациях ширины квантовых ям и проволок

Интересная и распространенная возможность для формирования размерноквантованных нульмерных состояний возникает в случае, когда ширина квантовой ямы или толщина квантовой проволоки зависит от координаты. Рассмотрим для определенности квантовую яму ширины *a*, которая плавно<sup>1</sup> зависит от координат *x*, *y* в плоскости ямы. Пусть барьеры бесконечно-высокие Уравнение Шредингера в приближении эффективной массы имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dz^2} + \Delta_{x,y}\right) \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z), \quad \psi(x,y,z) = \pm a/2) = 0.$$
(5.22)

Искать решение будем в рамках адиабатического приближения, представив (для простоты рассматриваем основное состояние поперечного движения)

$$\psi(x, y, z) = \Phi(x, y) \cos\left(\frac{\pi z}{a(x, y)}\right).$$
(5.23)

Тогда эффективное уравнение Шредингера для огибающей, описывающей движение электрона в плоскости ямы, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{x,y}\Phi(x,y) + U(x,y)\Phi(x,y) = E\Phi(x,y),$$
 (5.24)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>*Bonpoc:* сформулируйте критерий.

Размерное квантование и граничные условия для плавных огибающих 52

где эффективный потенциал

$$U(x,y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2(x,y)}.$$
 (5.25)

Области утолщения ямы таким образом играют роль притягивающего потенциала, который может локализовать электрон. Аналогично рассматривается задача о квантовой проволоке.

#### 5.5 Энергетическая плотность состояний

Рассмотрим энергетический спектр  $E_{nk}$  квазичастицы в пространстве размерности d = 3, 2, 1 и 0, где n – дискретное квантовое число или набор таких чисел, k – d-компонентный волновой вектор; при d = 0 волновой вектор как величина, характеризующая квантовые состояния, отсутствует. Энергетической плотностью состояний назовем число квантовомеханических состояний, приходящихся на единичный интервал энергии и на единичный объем d-мерного пространства. С помощью аппарата  $\delta$ функций плотность состояний можно представить в виде

$$\mathcal{D}_d(E) = \frac{2}{\mathcal{V}_d} \sum_{n\mathbf{k}} \delta(E - E_{n\mathbf{k}}) , \qquad (5.26)$$

где множитель 2 учитывает двукратное вырождение электронных состояний по спину,  $\mathcal{V}_d$  - обобщенный объем, который при d = 3 есть объем образца, понимаемый в обычном смысле, а для полупроводниковых низкоразмерных систем он равен площади образца в плоскости интерфейсов в случае квантовых ям (d = 2), длине квантовой проволоки (d = 1) и просто единице для квантовой точки (d = 0). Разложим  $E_{nk}$  в ряд по степеням k и ограничимся квадратичным приближением

$$E_{n\boldsymbol{k}} = E_n^0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_n} \,,$$

где имеющий размерность массы параметр  $M_n$  принимает значения между  $m_A$  и  $m_B$ . Подставляя это разложение в (5.26), получаем выражение для вклада ветви n в плотность состояний:

$$\mathcal{D}_{3}(E) = \frac{1}{2\pi^{2}} \left(\frac{2M_{n}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \sqrt{E - E_{n}^{0}} \,\theta(E - E_{n}^{0}) \,,$$

Размерное квантование и граничные условия для плавных огибающих 53

$$\mathcal{D}_{2}(E) = \frac{M_{n}}{\pi \hbar^{2}} \,\theta(E - E_{n}^{0}) ,$$
$$\mathcal{D}_{1}(E) = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{2M_{n}}{\hbar^{2}(E - E_{n}^{0})} \right]^{1/2} \,\theta(E - E_{n}^{0}) ,$$
$$\mathcal{D}_{0}(E) = 2 \,\delta(E - E_{n}^{0}) ,$$

где  $\theta(x)$  - ступенчатая функция, принимающая значения 1 при положительных x и 0 при отрицательных x. Отметим, что в квантовой яме плотность состояний имеет характер горизонтальной ступеньки, в квантовой проволоке зависимость g(E) аналогична плотности электронных состояний в объемном полупроводнике, помещенном в квантующее магнитное поле, а в квантовой точке функция g(E) представляет собой набор изолированных пиков, уширенных с учетом конечности времени жизни электрона на уровнях размерного квантования.

## Лекция 6

## Метод матриц переноса

На прошлой лекции мы обсудили граничные условия в методе плавных огибающих и рассмотрели простейшие задачи о размерном квантовании в нуль-, одно- и двумерных системах. Обсудим теперь метод, который позволяет описывать распространение квазичастиц и волн в наноструктурах.

#### 6.1 Матрица переноса

Уравнения, описывающие распространение частиц или волн являются, как правило, дифференциальными уравнениями второго порядка. При изучении задачи в одномерной геометрии (например, при исследовании переноса в слоистых структурах) достаточно знать значение волновой функции (или величины поля) и ее производной в данной точке, чтобы восстановить решение во всем пространстве.

Для определенности рассмотрим распространение электрона в слоистой структуре. Пусть на границах слоев А и В выполнены условия непрерывности плавной огибающей волновой функции,

$$\varphi|_A = \varphi|_B, \tag{6.1a}$$

и ее производной с некоторым коэффициентом:

$$C_A \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\Big|_A = C_B \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z}\Big|_B.$$
(6.1b)

В частном случае граничных условий Бастарда  $C_A = 1/m_A, C_B = 1/m_B.$ 

Введем двухкомпонентный столбец

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{bmatrix} \varphi(z) \\ \frac{C}{C_A} \frac{1}{k_A} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} \end{bmatrix}, \qquad (6.2)$$

где C – соответствующая константа в данном слое,  $k_A$  – волновой вектор в слое A. По определению, матрица переноса от точки z к точке z' есть  $\hat{t}(z', z)$ :

$$\hat{\varphi}(z') = \hat{t}(z', z)\hat{\varphi}(z). \tag{6.3}$$

Легко проверить, что матрица переноса через интерфейс между материалами A и B просто-напросто является единичной:

$$t_{\rm int} = \left[ \begin{array}{cc} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{array} \right].$$

Матрица переноса через однородный слой получается из решения уравнения Шредингера (*получите этот ответ дома*):

$$\hat{t}(l) = \begin{bmatrix} \cos kl & \frac{1}{N}\sin kl \\ -N\sin kl & \cos kl \end{bmatrix}.$$
(6.4)

Здесь l – толщина слоя, k – волновой вектор в этом слое,  $N = (Ck)/(C_A k_A)$ . Задача. Проверить, что  $\hat{t}(2l) = [\hat{t}(t)]^2$ .

Формула (6.22) была получена для надбарьерного движения, когда k – вещественное. Как изменится ее вид при распространении под барьером? Заменим  $k \rightarrow iæ$ , ch  $x = \cos ix$ , sh  $x = -i \sin ix$ .

Существует и другое представление матриц переноса. Запишем в данном слое решение уравнения Шредингера (или волнового уравнения) как

$$\varphi(z) = \varphi_+ e^{ikz} + \varphi_- e^{-ikz}. \tag{6.5}$$

Коэффициенты  $\varphi_+, \varphi_-$  полностью определяют решение.

Удобно приводить матрицу переноса в базисе  $\varphi_+ e^{ikz}$ ,  $\varphi_- e^{-ikz}$  (иначе фазовые множители будут присутствовать в матрицах переноса через интерфейс). Указанный базис называют базисом волн, распространяющихся слева направо и справа налево. Тогда матрица переноса, действующая на столбец

$$\hat{\psi} = \begin{bmatrix} \varphi_+ e^{\mathbf{i}kz} \\ \varphi_- e^{-\mathbf{i}kz} \end{bmatrix},\tag{6.6}$$

Метод матриц переноса

согласно

$$\hat{\psi}(z') = \hat{T}(z', z)\hat{\psi}(z), \qquad (6.7)$$

например, для однородного слоя толщины *l* имеет вид

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} e^{ikl} & 0\\ 0 & e^{-ikl} \end{bmatrix}.$$
(6.8)

Перенос через интерфейс между слоями A и B описывается чуть более сложной матрицей. Из требований непрерывности функции  $(\varphi_+ + \varphi_-)_A = (\varphi_+ + \varphi_-)_B$ , а также непрерывности потока  $C_A i k_A (\varphi_+ - \varphi_-)_A = C_B i k_B (\varphi_+ - \varphi_-)_B$  получаем

$$\hat{T}_{\rm int} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{C_A k_A}{C_B k_B} & 1 - \frac{C_A k_A}{C_B k_B} \\ 1 - \frac{C_A k_A}{C_B k_B} & 1 + \frac{C_A k_A}{C_B k_B} \end{bmatrix}.$$
(6.9)

Равенство определителя этой матрицы величине  $C_A k_A / (C_B k_B)$  описывает сохранение потока.

Задача. Как связать матрицы переноса в базисах (6.18) и (6.6)?

## 6.2 Матрица переноса через произвольный барьер



Рис. 6.1: Иллюстрация прохождения через симметричный барьер.

Рассмотрим произвольный барьер, характеризующийся амплитудными коэффициентами пропускания t и отражения r. Потребуем дополнительно, чтобы барьер был симметричный (коэффициенты t и r слева направо такие же, как t и r справа налево). Определим матрицу переноса через такой барьер. Легко проверить, что матрица переноса удовлетворяет следующим уравнениям (см. рис. 6.1):

$$\begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} = \hat{T} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} r \\ 1 \end{bmatrix} = \hat{T} \begin{bmatrix} 0 \\ t \end{bmatrix}.$$
(6.10)

Несложно убедиться, что

$$\hat{T} = \frac{1}{t} \begin{bmatrix} t^2 - r^2 & r \\ -r & 1 \end{bmatrix}.$$
(6.11)



Рис. 6.2: Иллюстрация прохождения через асимметричный барьер.

А как быть, если барьер асимметричный? Для того, чтобы установить вид матрицы переноса в этом случае воспользуемся инвариантностью к обращению хода времени. Это означает, что если (см. рис. 6.2)

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \hat{T} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix},$$
$$\begin{bmatrix} d^* \\ c^* \end{bmatrix} = \hat{T} \begin{bmatrix} b^* \\ a^* \end{bmatrix}$$

то и

Поэтому  $T_{22}=T_{11}^{\ast},\,T_{21}=T_{12}^{\ast}.$  Если воспользоваться сохранением потока, то<sup>1</sup>

$$|a|^{2} - |b|^{2} = |c|^{2} - |d|^{2}, (6.12)$$

и мы получаем требование унимодулярности матрицы  $\hat{T}$ . Окончательно<sup>2</sup>

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{bmatrix}.$$
(6.13)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Что здесь предполагается?

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Почему? Как поменяется ответ (6.13), если не требовать сохранения потока (6.12)?

Вопрос. Как связаны коэффициенты пропускания/отражения через

асимметричный барьер справа налево  $(t_1, r_1)$  и слева направо (t, r)? Ответ. Воспользуемся (6.13):  $\hat{T}[0, t_1]^T = [r_1, 1]^T$ , откуда  $t_1 = t$ ,  $r_1 =$  $-r^{*}(t/t^{*}).$ 

#### Двухбарьерные структуры 6.3



Рис. 6.3: Собственные моды в полости.

Рассмотрим некоторый слой, зажатый между барьерами. Такая система для электронов аналогична резонатору Фабри-Перо для света – структуры, состоящей из двух зеркал с коэффициентами отражения r, и слоя, характеризуемого матрицей переноса *T*. Уравнение на собственные моды имеет вид (рис. 6.3)

$$\hat{T} \begin{bmatrix} r\\1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A\\Ar \end{bmatrix}.$$
(6.14)

Исключая неизвестную амплитуду А из этого уравнения получаем

$$\frac{T_{11}r + T_{12}}{T_{21}r + T_{22}} = \frac{1}{r}.$$

В частном случае однородного слоя с матрицей переноса (6.8) имеем

$$e^{2ikl} = 1/r^2. (6.15)$$

Для непроницаемого барьера  $r^2 = 1$ , тогда условие (6.15) дает  $kl = \pi N$ ,  $N = 1, 2, 3, \dots$ 

*Bonpoc.* Какой физический смысл комплексного  $r \in |r| = 1$ ? Что характеризует фаза коэффициента отражения?

Наконец, рассмотрим двухбарьерную структуру. Матрицу переноса через нее можно представить как $^3$ 

$$\hat{T}_{\rm db} = \frac{1}{t_L t_R} \left[ \begin{array}{cc} t_R^2 - r_R^2 & r_R \\ -r_R & 1 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cc} {\rm e}^{{\rm i}kl} & 0 \\ 0 & {\rm e}^{-{\rm i}kl} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{cc} t_L^2 - r_L^2 & r_L \\ -r_L & 1 \end{array} \right],$$

где нижние индексы L и R относятся к левому и правому барьерам, соответственно. Пользуясь вторым уравнением (6.13) получаем, что коэффициент пропускания через всю структуру есть

$$t_{\rm db} = \frac{1}{\left(\hat{T}_{\rm db}\right)_{22}} = \frac{t_L t_R \mathrm{e}^{\mathrm{i}kl}}{1 - r_L r_R \mathrm{e}^{2\mathrm{i}kl}}.$$
 (6.16)

Обратите внимание на то, что полюса знаменателя (при  $r_L = r_R$ ) описываются уравнением (6.15). К этой формуле можно придти и иначе, просто просуммировав геометрическую прогрессию, соответствующую всем возможным траекториям электрона между барьерами.

Из уравнения (6.16) можно получить коэффициент пропускания по потоку

$$T = |t_{\rm db}|^2 = \frac{|t_L|^2 |t_R|^2}{(1 - |r_L r_R|)^2 + 4|r_L r_R|\sin^2\vartheta},$$

где  $\vartheta = kl + (\vartheta_L + \vartheta_R)/2$  (два последних слагаемых – фазы коэффициентов отражения барьеров). Для достаточно толстых барьеров в "резонансе"  $\sin \vartheta = 0$  и

$$T = \frac{|t_L|^2 |t_R|^2}{(1 - |r_L r_R|)^2} \approx \frac{4|t_L|^2 |t_R|^2}{(|t_L|^2 + |t_R|^2)^2}.$$

Вблизи резонанса

$$T = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\left(\frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{2}\right)^2 + \left(E - E_0\right)^2},\tag{6.17}$$

где  $\Gamma_{L,R} = (dE/dk)(dk/d\vartheta)|t_{L,R}|^2$ , а  $E_0$  соответствует  $\sin \vartheta = 0$ .

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Здесь считается, что каждый барьер симметричный. Что будет в общем случае?

Метод матриц переноса

#### 6.4 Периодические системы

Метод матриц переноса особенно удобен для исследования периодических систем: сверхрешеток и одномерных фотонных кристаллов. Мы будем использовать базис матриц переноса в виде

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{bmatrix} \varphi(z) \\ \frac{C}{C_A} \frac{1}{k_A} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}z} \end{bmatrix}, \qquad (6.18)$$

где C – константа в граничных условиях для данного слоя,  $k_A$  – волновой вектор в слое A.

Пусть мы рассматриваем периодическую систему, состоящую из слоев А и В. Согласно теореме Блоха, волновые функции в такой структуре можно выбрать в виде

$$\varphi(z+d) = e^{iKd}\varphi(z), \qquad (6.19)$$

где d = a + b – период структуры, a и b толщины соответствующих слоев, K – квазиволновой вектор. Теорему Блоха можно переписать в терминах матрицы переноса как

$$\hat{t}_{\rm B}\hat{t}_{\rm A}\hat{\varphi}(0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Kd}\hat{\varphi}(0), \qquad (6.20)$$

откуда

$$\cos Kd = \frac{t_{11} + t_{22}}{2},\tag{6.21}$$

где  $t_{ij}$  – матричные элементы матрицы переноса через оба слоя. Напомним, что матрица переноса через один слой задается выражением

$$\hat{t}(l) = \begin{bmatrix} \cos kl & \frac{1}{N}\sin kl \\ -N\sin kl & \cos kl \end{bmatrix}.$$
(6.22)

Здесь l – толщина слоя, k – волновой вектор в этом слое,  $N = (Ck)/(C_A k_A)$ .

Задача. Как будет выглядеть дисперсионное уравнение в базисе волн, распространяющихся направо и налево? Докажите, что также, как и уравнение (6.21).

Рассмотрим, для примера, структуру, состоящую из симметричных барьеров с коэффициентами прохождения и отражения t и r, соответственно, разделенными областями шириной a. Дисперсионное уравнение можно записать как

$$\cos Kd = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{ika} + \frac{1}{2t} e^{-ika}.$$
 (6.23)

Представим  $t = |t|e^{i\delta}$ , воспользуемся соотношением  $1/t^* = (t^2 - r^2)/t$ (это следует из симметрии к обращению знака времени: состояние  $[1, r]^T$ слева от барьера меняется на  $[r^*, 1]^T$  и т.п.). Тогда получим

$$\cos Kd = \frac{\cos(ka+\delta)}{|t|}.$$
(6.24)

Отметим, что последнее выражение верно в общем случае асимметричных барьеров. Его легко получить из формул для матрицы переноса, не предполагающих наличие плоскости зеркального отражения в группе симметрии барьера.

Для прямоугольных барьеров можно получить дисперсионное соотношение в виде (*докажите*)

$$\cos Kd = \cos k_A a \cos k_B b - \frac{1}{2} \left( N_B + \frac{1}{N_B} \right) \sin k_A a \sin k_B b.$$
(6.25)

Если в слое В частица распространяется под барьером, то дисперсионное уравнение принимает вид (заменим  $k_B \rightarrow i æ_B$ , ch  $x = \cos i x$ , sh  $x = -i \sin i x$ )

$$\cos Kd = \cos k_A a \operatorname{ch} \mathfrak{a}_B b + \frac{1}{2} \left( \eta_B - \frac{1}{\eta_B} \right) \sin k_A a \operatorname{sh} \mathfrak{a}_B b, \qquad (6.26)$$

где  $\eta_B = C_B \mathfrak{a}_B / (C_A k_A).$ 

Какова будет дисперсия электронов в случае "высоких" и "широких" барьеров ( $\mathfrak{a}_B \gg k_A$ ,  $\mathfrak{a}_B b \gg 1$ , предел узких зон)? В этом пределе главным является вклад с  $\eta_B$  в правой части (6.26), поэтому дисперсионное соотношение принимает вид

$$-4\frac{k_A m_B}{\alpha_B m_A} e^{-\alpha_B b} \cos K d = \sin k_A a.$$

Легко видеть, что при  $\mathfrak{B}_B \to \infty$  это уравнение дает состояния в одномерной яме с бесконечным барьером  $\sin k_A a = 0$  или  $k_A a = \pi n, n \in \mathbb{N}$ . Определим дисперсию, соответствующую основной минизоне, где  $k_A \approx \pi/a$ . В главном порядке по  $e^{-\mathfrak{B}_B b}, k_A/\mathfrak{B}_B$  имеем

$$E(K) - E(0) \propto \cos Kd. \tag{6.27}$$

Этот же ответ можно получить из формулы (6.24) при  $|t| \to 0$ . Положив t = 0 имеем уравнение на края зон  $\cos(ka + \delta) = 0$ , решение которого

 $k_n a = -\delta + \pi/2 + \pi n, n \in \mathbb{N}$ . Эти значения  $k_n$  определяют энергию краев зон  $E_n(0) = \hbar^2 k_n^2/2m$ . При малом, но конечном |t| раскладываем правую часть (6.24) до линейных по  $E(K) - E_n(0)$  слагаемых согласно

$$\cos(ka+\delta) = [E(K) - E_n(0)] \frac{d}{dE} \frac{\cos(ka+\delta)}{|t|} = (-1)^{n-1} [E(K) - E_n(0)] \left. \frac{d(ka+\delta)}{dE} \right|_{E=E_n}$$

Отметим, что член с $d|t|^{-1}/dE$ выпадает из-за условия  $\cos{(ka+\delta)}=0$ при $E=E_n.$ 

Задача. Проанализируйте случай почти проницаемых барьеров, устремив  $|t| \rightarrow 1$  в выражении (6.24).

Задача. Для дисперсионного уравнения в виде (6.26) найдите условие, при котором дисперсия вблизи K = 0 или  $K = \pi/d$  описывается линейным законом:  $E(K) = E_0 + uK$  ( $Kd \ll 1$ ). Считать, что в каждом из слоев дисперсия частицы параболическая  $k_A = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ,  $k_B = \sqrt{2m(E-V)/\hbar^2}$ , V < E – высота барьера, m – эффективная масса, которую считаем одинаковой в слоях A и B.

*Ответ.*  $k_A a = \pi n$  и  $k_B b = \pi m$ , где n, m – натуральные числа.

## 6.4.1 Распространению волн в одномерных фотонных кристаллах

Хорошо известно, что на границах двух диэлектриков сохраняются тангенциальные компоненты электрического поля  $E_{\parallel,1} = E_{\parallel,2}$  и нормальные компоненты вектора индукции  $D_{\perp,1} = D_{\perp,2}$ . Для простоты рассмотрим случай изотропных диэлектриков, где  $D = \varepsilon E$ , скаляр  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость.

Электромагнитное поле является по своей природе векторным. Кроме того, как хорошо известно, поле поперечно: вектора k (волновой вектор), D и B взаимно перпендикулярны. Поэтому при распространении волны в одномерном фотонном кристалле нужно выделить два случая. Пусть свет падает в плоскости (xz).

*s-поляризация*. Вектор  $E \parallel D$  находится в плоскости слоев. Пусть  $E \parallel y$ , а ось z – ось сверхрешетки. На границах между диэлектриками величина  $E_y$  сохраняется (тангенциальная компонента поля), кроме того сохраняется  $\partial E_y/\partial z \propto B_x$  (немагнитные среды). Тогда

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{bmatrix} E_y(z) \\ \frac{1}{k_A} \frac{\mathrm{d}E_y}{\mathrm{d}z} \end{bmatrix}.$$
(6.28)

*р-поляризация*. Вектор  $E \perp y$ , тогда  $B \parallel y$ . На границах, очевидно, непрерывно магнитное поле  $B_y$ , а также

$$\frac{1}{\varepsilon_A} \frac{\partial B_y}{\partial z} \bigg|_A = \frac{1}{\varepsilon_B} \frac{\partial B_y}{\partial z} \bigg|_B,$$

т.к.  $[\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{B}] = c^{-1} \partial \boldsymbol{D} / \partial t$ . В этом случае

$$\hat{\varphi}(z) = \begin{bmatrix} B_y(z) \\ \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\varepsilon_A}{k_A} \frac{\mathrm{d}B_y}{\mathrm{d}z} \end{bmatrix}.$$
(6.29)

Интересно исследовать предел тонких по сравнению с длинной волны слоев. В *s*-поляризации

$$\bar{D}_y = \frac{aD_A + bD_B}{a+b} = \varepsilon_{\perp}^{\text{(eff)}} E_y,$$

где

$$\varepsilon_{\perp}^{(\text{eff})} = \frac{\varepsilon_a a + \varepsilon_b b}{a+b}.$$

В *р*-поляризации

$$\bar{E}_z = \frac{aE_A + bE_B}{a+b} = \frac{1}{\varepsilon_{\parallel}^{\text{(eff)}}} D_z$$

где

$$\varepsilon_{\parallel}^{(\text{eff})} = (a+b) \left(\frac{a}{\varepsilon_A} + \frac{b}{\varepsilon_B}\right)^{-1}$$

Модель одномерной брегговской решетки из квантовых ям. Рассмотрим слоистую структуру, состоящую из квантовых ям, разделенных барьерами, см. рис. 6.4. Коэффициент отражения света с частотой  $\omega$  от ямы (это будет показано на лекции ??)

$$r = \frac{\mathrm{i}\Gamma_0}{\omega_0 - \omega - \mathrm{i}(\Gamma_0 + \Gamma)},\tag{6.30}$$

где  $\omega_0$  частота экситонного резонанса,  $\Gamma_0$  – радиационное и  $\Gamma$  – нерадиационное затухания экситона. Пусть ширина запрещенной зоны барьера существенно превышает  $\hbar\omega_0$ , поэтому резонансным откликом барьера пренебрежем и будем описывать его как однородный слой с заданным показателем преломления *n*. Дисперсионное соотношение в слое  $\omega = ck/n$ ,



Рис. 6.4: Одномерная решетка из квантовых ям.

считаем, что толщина барьер<br/>аLтакова, что выполнено брэгговское условие

$$k(\omega_0)L = \pi N, \quad N \in \mathbb{N}. \tag{6.31}$$

Задача. Рассчитать (на компьютере) коэффициент пропускания или отражения света от структуры из *n* ям.

Результат расчета коэффициента пропускания по интенсивности показан на рисунке 6.5. При малых n ( $n \leq \sqrt{\omega_0/\Gamma_0}$ ) спектр уширяется, причем коэффициент отражения  $r_n$  такой структуры дается формулой (6.30) с заменой  $\Gamma_0 \to n\Gamma_0$ .<sup>4</sup> При больших n формируется запрещенная зона – "полка" в коэффициенте пропускания.



Рис. 6.5: Коэффициент пропускания структуры из n ям (левая панель: n от 1 до 51 с шагом 5, правая панель: n от 1 до 250 с шагом 25),  $\hbar\omega_0 = 1.5$  эВ,  $\Gamma_0 = 0.1$  мэВ,  $\Gamma = 0.5$  мэВ.

 $^{4}$ Почему?

## Лекция 7

## Туннельный транспорт электронов

Завершим обсуждение метода матриц переноса его применениями к транспортным эффектам.

#### 7.1 Туннельный ток в электрическом поле

Рассмотрим структуру с одномерным потенциальным барьером или барьерами, причем особый интерес представляют двухбарьерные структуры, где может быть реализовано резонансное туннелирование. Нас интересует электрический ток, возникающий в такой структуре при приложении внешнего электрического поля. Считаем, что барьер находится между двумя полубесконечными металлами (или легированными полупроводниками), в которых электроны находятся в термодинамическом равновесии (геометрические размеры берегов превосходят характерные длины релаксации импульса и энергии электрона). Для простоты считаем, что в берегах имеется вырожденный электронный газ, к структуре приложено напряжение V, при этом разность энергий Ферми электронов в берегах составляет U = eV. Задачу будем решать в приближении эффективной массы.

Вычислим *z*-компоненту плотности тока (нормировочный объем в дальнейших выкладках полагаем  $\mathcal{V} = 1$ ):

$$j_z = j_{\rightarrow} - j_{\leftarrow} = 2e \sum_{\boldsymbol{k}} v_z(\boldsymbol{k}) T(\boldsymbol{k}) \left[ f_L(\boldsymbol{k}) \Theta(k_z) + f_r(\boldsymbol{k}) \Theta(-k_z) \right].$$
(7.1)

Здесь множитель 2 связан с учетом спина электрона,  $v_z(\mathbf{k}) = \hbar k_z/m$  – скорость электрона,  $T(\mathbf{k}) = |t|^2$  – коэффициент пропускания барьера,  $f_{L,R}(\mathbf{k})$  – функции распределения электронов в левом (L) и правом (R) барьерах,  $\Theta(k_z)$  – функция Хевисайда.

Общее выражение (7.1) можно упростить, предполагая электронный газ вырожденным с энергией Ферми  $E_F$ . В таком случае вклад в ток вносят электроны лишь из полоски энергий от  $E_F - U$  до  $E_F$ . Таким образом

$$j_z = 2e \sum_{\boldsymbol{k}} v_z(\boldsymbol{k}) T(\boldsymbol{k}) \Theta(k_z) \Theta(E_z + E_{\parallel} - E_F + U) \Theta(E_F - E_z - E_{\parallel}),$$

где  $E_z = \hbar^2 k_z^2/2m, E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2/2m$ . Переходя от суммирования по k к интегрированию по  $E_{\parallel}$  и по  $k_z$  получаем

$$j_{z} = 2e \frac{m}{2\pi\hbar^{2}} \int_{0}^{\infty} dE_{\parallel} \int_{0}^{\infty} \frac{dk_{z}}{2\pi} \frac{\hbar}{m} k_{z} T(\mathbf{k}) \Theta(E_{z} + E_{\parallel} - E_{F} + U) \Theta(E_{F} - E_{z} - E_{\parallel})$$
$$= \frac{em}{2\pi^{2}\hbar^{3}} \int_{0}^{\infty} dE_{\parallel} \int_{0}^{\infty} dE_{z} T(E_{\parallel}, E_{z}) \Theta(E_{z} + E_{\parallel} - E_{F} + U) \Theta(E_{F} - E_{z} - E_{\parallel}).$$
(7.2)

Здесь мы предположили, что коэффициент пропускания через барьер зависит от энергий  $E_{\parallel}, E_z$ .

В нерезонансном случае при  $|U| \ll E_F$  зависимость T от энергии несущественна, туннельный ток пропорционален U,

$$j_z = \frac{em}{2\pi^2\hbar^3} T E_F U.$$

В известном смысле такой туннельный ток мал (в меру малой прозрачности туннельный барьеров,  $T \ll 1$ ).

Ситуация кардинально меняется в условиях *разонансного* туннелирования. При наличии приложенного напряжения V в резонансной туннельной структуре возникают три эффекта

- 1. Сдвиг энергий барьеров
- 2. Сдвиг энергии резонансного уровня
- 3. Изменение прозрачности барьеров

Мы будем рассматривать простейшую постановку задачи, считая, что приложенное напряжение достаточно велико, так что в правом береге  $f_R = 0$ , а в левом береге энергия Ферми электронов равна  $E_F$ . Мы также пренебрежем изменением туннельной прозрачности барьеров, и будем считать, что при наличии напряжения резонансный уровень смещается на величину  $\xi U = \xi eV$  (типично  $\xi \approx 1/2$ ). Коэффициент пропускания через двухбарьерную структуру записывается в виде [ср. с (6.17)]

$$T = \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{\left(\frac{\Gamma_L + \Gamma_R}{2}\right)^2 + \left(E_z - E_0 + \xi U\right)^2} \approx \pi \Gamma \delta(E_z - E_0 + \xi U), \qquad (7.3)$$

где

$$\Gamma = \frac{2\Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma_L + \Gamma_R}.$$

Замена лоренциана на  $\delta$ -функцию оправдана, если  $|U|, E_F \gg \Gamma$ . Общее выражение (7.2) упрощается с учетом отсутствия заселенности "конечных" состояний в правом береге и принимает вид

$$j_{z} = \frac{em}{2\pi^{2}\hbar^{3}} \int_{0}^{\infty} dE_{\parallel} \int_{0}^{\infty} dE_{z} \Theta(E_{F} - E_{\parallel} - E_{z})\pi\Gamma\delta(E_{z} - E_{0} + \xi U) \quad (7.4)$$
$$= \frac{em\Gamma}{2\pi\hbar^{3}} \int_{0}^{E_{F} - E_{0} + \xi U} dE_{\parallel} \Theta(E_{0} - \xi U) = \frac{em\Gamma}{2\pi\hbar^{3}} \begin{cases} E_{F} - E_{0} + \xi U, & 0 < E_{0} - \xi U < E_{F} \\ 0, & \text{иначе.} \end{cases}$$

Характерный режим  $E_0 > E_F$ , тогда вольт-амперная характеристика резонансной туннельной структуры имеет N-образный вид.

## 7.2 Транспорт в одномерных системах. Формула Ландауэра

Рассмотрим явления переноса электронов в одномерных системах (в квантовой проволоке, нанотрубке или квантовом точечном контакте). Запишем ток в виде [ср. с (7.1)]

$$I_z = 2e \sum_{k_z} v_z T(E) (f_L - f_R) = \frac{2e}{2\pi\hbar} \int_0^\infty dE \, T(E) [f_L(E) - f_R(E)].$$
(7.5)

Для вырожденных электронов и малой величине приложенного напряжения разность функций распределения может быть заменена на  $U\delta(E - F_F)$ , тогда

$$I_z = \frac{e}{\pi\hbar} UT(E_F). \tag{7.6}$$

О. Кондактанс одномерной системы

$$G = \frac{I_z}{U/e} = \frac{e^2}{\pi\hbar} T(E_F).$$
(7.7)

Формула (7.7) – формула Ландауэра.

В структуре с несколькими заполнеными одномерными подзонами  $G = e^2/(\pi\hbar) \sum_i T_i$ , где  $T_i$  – коэффициент пропускания электронов в *i*ой подзоне на уровне Ферми. Эту формулу можно записать в виде  $G = e^2/(\pi\hbar) \operatorname{Tr}\{t^{\dagger}t\}$ , где t – матрица переноса между состояниями в левом и правом береге (в произвольном базисе).

Для идеальной одномерной системы T=1и кондакт<br/>анс равен "кванту кондактанса"

$$G = G_0 = \frac{e^2}{\pi\hbar}.$$
(7.8)

Этот результат, на первый взгляд, противоречит здравому смыслу: если электрону негде рассеятся T = 1, то почему же проводимость конечна? На самом деле, импульс электронов (и их энергия) теряется в берегах, однако микроскопические параметры берега в ответ (7.8) для кондактанса идеальной одномерной системы не входят, поскольку берега предполагаются "макроскопическими".

## Приложение. Матрицы углового момента 3/2

Матрицы углового момента 3/2

$$\begin{split} J_x^3 = \begin{bmatrix} 0 & 7\sqrt{3}/8 & 0 & 3/4 \\ 7\sqrt{3}/8 & 0 & 5/2 & 0 \\ 0 & 5/2 & 0 & 7\sqrt{3}/8 & 0 \end{bmatrix}, \ J_y^3 = \begin{bmatrix} 0 & -i7\sqrt{3}/8 & 0 & i3/4 \\ i7\sqrt{3}/8 & 0 & -i5/2 & 0 \\ 0 & i5/2 & 0 & -i7\sqrt{3}/8 & 0 \end{bmatrix}, \\ J_z^3 = \begin{bmatrix} 27/8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -27/8 \end{bmatrix}, \\ V_x = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{3}/4 & 0 & -3/4 \\ -\sqrt{3}/4 & 0 & 3/4 & 0 \\ 0 & 3/4 & 0 & -\sqrt{3}/4 \\ -3/4 & 0 & -\sqrt{3}/4 & 0 \end{bmatrix}, \ V_y = \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{3}/4 & 0 & i3/4 \\ i\sqrt{3}/4 & 0 & i3/4 & 0 \\ 0 & -i3/4 & 0 & -i\sqrt{3}/4 \\ -i3/4 & 0 & i\sqrt{3}/4 & 0 \end{bmatrix}, \\ V_z = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ 2\{J_xJ_yJ_z\}_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i\sqrt{3}/2 \\ i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{split}$$

## Вопросы и задачи для самостоятельной работы
## Литература

- [1] *Бир Г., Пикус Г.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. — М. Наука, 1972.
- [2] Löwdin P.-O. A note on the quantum-mechanical perturbation theory // The Journal of Chemical Physics. - 1951. - Vol. 19, no. 11. - Pp. 1396-1401.
- [3] Абакумов В. Н., Перель В. И., Яссиевич И. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. — С.-Петербург, 1997.
- [4] Properties of the thirty-two point groups / G. F. Koster, R. G. Wheeler, J. O. Dimmock, H. Statz. — MIT Press, 1963.
- [5] Варшалович Д., Москалев А., Херсонский В. Квантовая теория углового момента. Ленинград. Наука, 1975.
- [6] Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S.-C. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells // Science. - 2006. --Vol. 314, no. 5806. -- Pp. 1757-1761.
- [7] Topological insulators in bi2se3, bi2te3 and sb2te3 with a single dirac cone on the surface / H. Zhang, C.-X. Liu, X.-L. Qi et al. // Nat Phys. – 2009. – Vol. 5, no. 6. – Pp. 438–442.
- [8] Bernevig B., Hughes T. Topological Insulators and Topological Superconductors. Princeton University Press, 2013.
- [9] General boundary conditions for the envelope function in the multiband k·p model / A. V. Rodina, A. Y. Alekseev, A. L. Efros et al. // Phys. Rev. B. - 2002. - Vol. 65. - P. 125302.