Электронные состояния в решетках квантовых точек и антиточек, помещенных в сильное магнитное поле

© В.Я. Демиховский, А.А. Перов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603600 Нижний Новгород, Россия

(Поступила в Редакцию 10 ноября 1997 г.)

Исследованы квантовые состояния электронов в системе точек (антиточек) в присутствии постоянного магнитного поля. Предложен новый численный метод расчета электронного спектра и волновых функций в двумерном периодическом потенциале и в перпендикулярном магнитном поле. Найдены энергии магнитных подзон, плотность электронных состояний, а также электронная плотность $|\psi(x,y)|^2$ и (при различных значениях магнитного поля) амплитуды потенциала, периода и степени анизотропии решетки. Расчеты проведены для квантовых точек в системах $In_{0.2}Ga_{0.8}As$–GaAs и GaAs–$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. Изучается перестройка спектра с изменением магнитного поля и переходом от приближения сильной ($\hbar\omega_c/V_0 \ll 1$) к приближению слабой связи ($\hbar\omega_c/V_0 \gg 1$) (ω_c — циклотронная частота, V_0 — амплитуда периодического потенциала). Результаты показывают, что в полученных в настоящее время двумерных решетках, возникающих на поверхности полупроводника в процессе эпитаксиального роста, возможно наблюдение квантовых эффектов, связанных с перестройкой спектра (электронный транспорт и оптическое поглощение) в магнитных полях $H \leq MG$.

Задача о поведении блоховского электрона во внешнем магнитном поле в течение многих лет неизменно привлекает внимание физиков. Основные представления о структуре соответствующих электронных состояний содержатся в [1–8]. Были развиты также численные методы расчета энергетического спектра и волновых функций электрона в двумерном периодическом и однородном перпендикулярном магнитном полях. В работах [9,10] решение уравнения Шредингера в присутствии периодического потенциала, инвариантное (с точностью до фазового множителя) относительно магнитных трансляций, представлялось в виде ряда по собственным функциям электрона в однородном магнитном поле, вычисленном в симметричной калибровке векторного потенциала $\mathbf{A}(-Hy/2, Hx/2, 0)$. Подобные функции, удовлетворяющие обобщенным условиям Блоха (функции нулевого приближения), были построены в работе Феррари [11]. В [9] с использованием базиса функций Феррари впервые проводились численные расчеты электронных состояний квадратной решетки квантовых точек и антиточек, полученной с помощью метода электронной литографии высокого разрешения (с периодом $a = 500$ nm и амплитудой потенциала $V_0 = 5$ meV), в присутствии магнитного поля.

Несмотря на постоянный интерес к проблеме и большое количество теоретических работ, к сожалению, до настоящего времени эффекты, связанные с перестройкой спектра блоховского электрона в магнитном поле, экспериментально не наблюдались (за исключением [12]).

В последнее время достигнут существенный прогресс в получении двумерных решеточных структур, состоящих из квантовых точек [13]. Такие структуры возникают в процессе эпитаксиального роста за счет спонтанной самоорганизации. В частности, в работе [14] были получены структуры, образованные квантовыми точками (In, Ga)As на подложке GaAs, с характерным периодом 15–30 nm. Далее приведены результаты расчета спектров, волновых функций и плотности электронных состояний в двумерной решетке, состоящей из квантовых точек и антиточек, с параметрами, аналогичными [14], в перпендикулярном поле $\mathbf{H}$. Показано, что эффекты радикальной перестройки спектра, определяющие транспорт и магнитооптику таких структур, должны наблюдаться экспериментально в магнитных полях $H \leq 1$ MG. Методики электрических и оптических измерений в магнитных полях порядка и более одного мегагаусса развиты в работах саровской группы (см., например, [15–17]).

1. Основные уравнения. Метод расчета

Уравнение Шредингера для двумерного электрона, движущегося в периодическом поле двумерной прямоугольной решетки в плоскости (x, y) и в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси z, имеет вид

$$(\hat{H} - E)\psi = \left\{ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m^*} + V(x,y) - E \right\} \psi = 0, \quad (1)$$

где m^* — эффективная масса, e — заряд электрона, c — скорость света, $\mathbf{p}$ — обобщенный импульс, для векторного потенциала в дальнейшем выбрана калибровка Ландау $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$. Потенциал двумерной решетки в (1) будет задаваться периодической функцией

$$V(x,y) = -V_0 \cos^2(\pi x/a) \cos^2(\pi y/b). \quad (2)$$

Положительный знак V_0 соответствует системе квантовых точек, отрицательный — системе антиточек. Период решетки по x и по y равен a и b соответственно. Будем считать, что движение электрона в направлении z ограничено, и он находится в низшей подзоне размерного квантования.

Если число квантов магнитного потока через элементарную ячейку, задаваемую векторами $\mathbf{a}_1(a, 0)$ и $\mathbf{a}_2(0, b)$, является рациональным числом p/q (p и q — взаимно

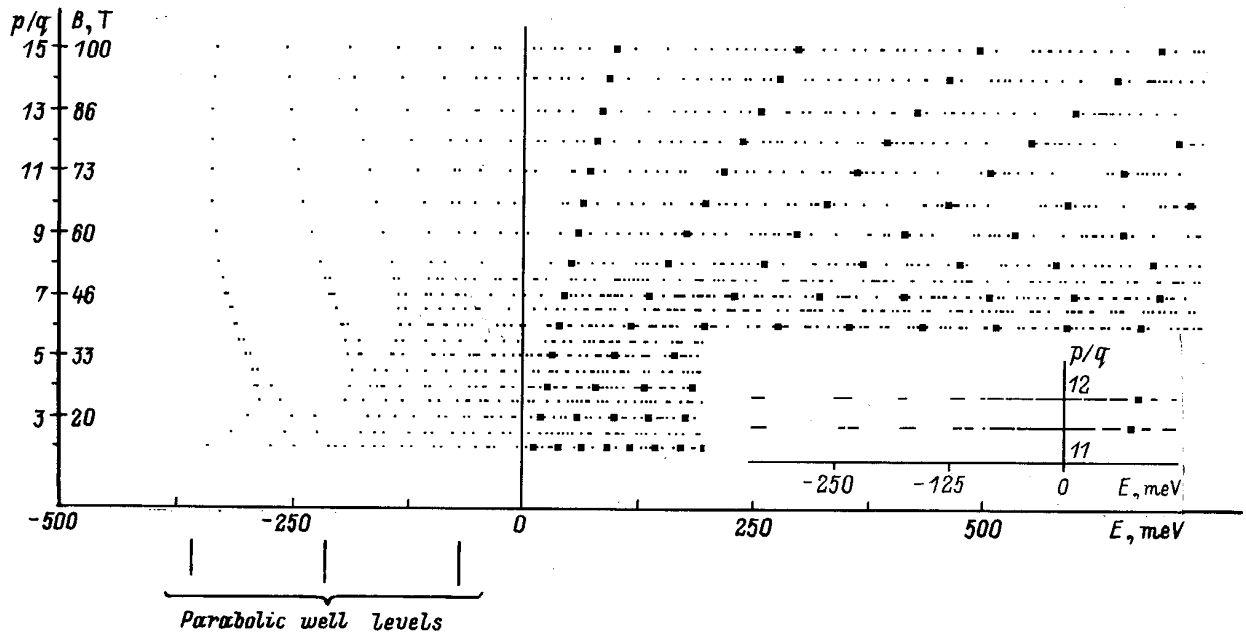

Рис. 1. Энергетический спектр квадратной решетки квантовых точек $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ ($a = b = 25$ nm, $V_0 = 500$ meV), помещенной в магнитное поле при $k_x = k_y = 0$. На вставке показана структура магнитных подзон для $p/q = 11$ и 12.

простые числа), решения стационарного уравнения Шредингера (1) должны удовлетворять обобщенным условиям Блоха

$$\psi_{k_x,k_y}(x,y) = \psi_{k_x,k_y}(x+qa, y+b)\exp(-ik_xqa) \times \exp(-ik_yb)\exp(-2\pi ipy/b). \quad (3)$$

Если векторы магнитных трансляций выбраны в виде $\mathbf{a}_n = n_1q\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2$, где n_1 и n_2 — любые целые числа, то при трансляции на вектор $\mathbf{a}_n$ волновая функция переходит в функцию с тем же квазиимпульсом $\mathbf{k}(k_x, k_y)$.

Решение (1), удовлетворяющее граничным условиям (3), будем искать в виде ряда по собственным функциям нулевого гамильтониана $\hat{H}_0 = (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2/2m^*$, соответствующим собственным значениям $E_N^0 = \hbar\omega_c(N + 1/2)$, где N — номер уровня Ландау. Поскольку в калибровке Ландау функции, отвечающие энергии E_N^0, — плоские волны в направлении y и собственные функции гармонического осциллятора в направлении x, решение исходного уравнения (1) может быть представлено в виде ряда [18]

$$\psi_{k_x,k_y}(x,y) = \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{n=1}^{p} C_{Nn} \times \sum_{s=-\infty}^{+\infty} \chi_N\left(\frac{x - x_0 - sqa - nqa/p}{l_H}\right) \times \exp\left(ik_x\left[sqa + \frac{nqa}{p}\right]\right) \times \exp\left(2\pi iy\frac{sp+n}{b}\right)\exp(ik_yy), \quad (4)$$

где $x_0 = c\hbar k_y/eH$, $\chi_N(x)$ — собственная функция гармонического осциллятора, $l_H^2 = \hbar c/eH$ — квадрат магнитной длины. Компоненты квазиимпульса k_x и k_y изменяются в пределах магнитной зоны Бриллюэна. Далее увидим, что, несмотря на различную зависимость от координат x и y функций, используемых в разложении (4), вычисленная плотность вероятности обладает полной симметрией гамильтониана $\hat{H}$.

Подставляя (4) в (1), придем к системе алгебраических уравнений, которая определяет энергетический спектр электрона $E(k_x, k_y)$ и собственные векторы гамильтониана C_{Nn}

$$\sum_{N'n'} H_{Nn}^{N'n'} C_{N'n'} = \sum_{N'n'} (E_{N'}^0 \delta_{N'N}\delta_{n'n} + V_{Nn}^{N'n'}(p/q, k_x, k_y))C_{N'n'} = EC_{Nn}. \quad (5)$$

Здесь $V_{Nn}^{N'n'}$ — матричные элементы периодического потенциала (2), вычисленные в базисе (4). Они выражаются через присоединенные полиномы Лагерра $L_i^j(l_H^2/a^2)$ [19]. Схема вычисления матричных элементов обсуждается в [18]. Матрица $H_{Nn}^{N'n'}$ имеет блочную структуру. Каждый блок нумеруется числами N' и N. Количество блоков определяется числом уровней Ландау, учитываемых в разложении (4). Каждый блок представляет собой квадратную трехдиагональную матрицу с размерностью $p \times p$, элементы блока задаются индексами n и n'. Таким образом, размерность полной матрицы равна $Np \times Np$. При численных расчетах число уровней Ландау (число блоков матрицы $H_{Nn}^{N'n'}$) определялось экспериментальным путем так, чтобы спектр в определенном интервале энергий и соответствующие волновые функции не зависели от числа N. Заметим, что структура матричных элементов $V_{Nn}^{N'n'}$ и система уравнений (5) представляется нам более простой, чем система, использованная в [9]. В то же время для параметров решетки, указанных в работе [9], наш метод дает аналогичные результаты.

2. Результаты и их обсуждение

Нами были проведены расчеты спектров, волновых функций и плотности состояний для различных типичных параметров двумерных решеток, состоящих из квантовых точек и антиточек. На рис. 1, 2 приведены результаты расчета энергетических спектров в решетках квантовых точек в системе $In_xGa_{1-x}As$–GaAs, помещенных в GaAs при различных значениях H. В расчетах предполагалось, что концентрация твердого раствора x была равна 0.2. Скачок потенциала на границе $In_{0.2}Ga_{0.8}As$–GaAs имел типичное значение $V_0 = 500\,\mathrm{meV}$, эффективная масса $m^* = 0.0582 m_e$, что соответствует $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ и не более чем на 10% отличается от $m^*_{GaAs} = 0.067 m_e$.

Обсудим эволюцию энергетических зон при изменении магнитного поля. На рис. 1 представлена зависимость положения уровней в центре магнитных подзон ($k_x = k_y = 0$) в системе точек с периодами $a = b = 25\,\mathrm{nm}$ от величины приложенного магнитного поля. По вертикальной оси отложено число квантов магнитного потока через элементарную ячейку ($p/q \geq 2$). Из этого рисунка видно, что как в области отрицательных, так и в области положительных энергий уровни имеют тенденцию сгущаться к невозмущенным уровням Ландау. Положение последних показано жирными точками. При учете зависимости $E(k_x, k_y)$ уровни размываются в магнитные подзоны, которые могут перекрываться. Это иллюстрирует вставка на рис. 1, где показаны магнитные подзоны для $p/q = 11, 12$. Под каждым уровнем Ландау образуется несколько подзон, причем с ростом магнитного поля расстояние между подзонами увеличивается, и при $p/q \geq 10$ число неперекрывающихся подзон равно p. Приведенные данные свидетельствуют о том, что в магнитных полях порядка 1 MG расстояние между магнитными подзонами может существенно превышать естественную ширину уровней $\Delta E \sim \hbar/\tau_{\mathrm{rel}}$ при типичных значениях $\tau_{\mathrm{rel}} \sim 10^{-12}\,\mathrm{s}$. Поэтому в рассмотренной ситуации возможно экспериментальное наблюдение эффектов (транспорт, оптическое поглощение и т. п.), связанных с перестройкой спектра сверхрешетки в поле H.

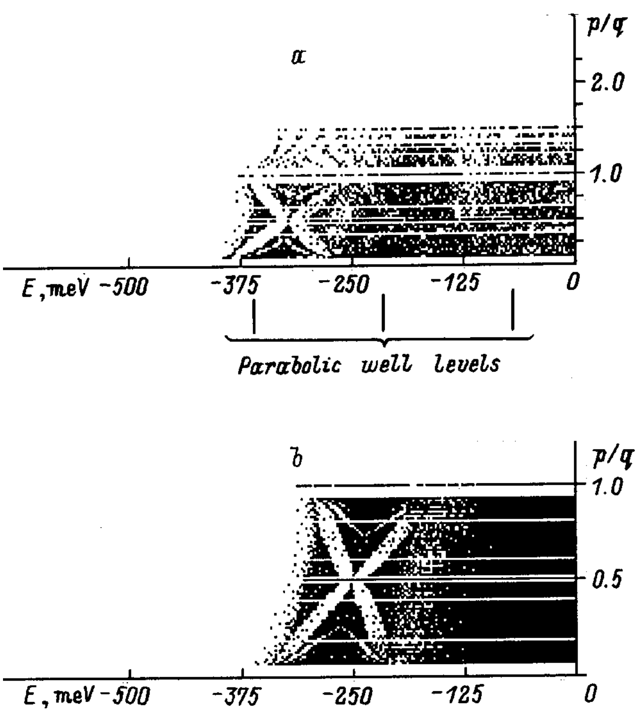

Рис. 2. Электронный спектр в решетке квантовых точек $In_{0.2}Ga_{0.8}As$ ($V_0 = 500\,\mathrm{meV}$). a — изотропная решетка ($a = b = 25\,\mathrm{nm}$), b — анизотропная решетка ($a = 25\,\mathrm{nm}$, $b = 20\,\mathrm{nm}$). В нижней части рисунка показаны уровни параболической ямы, аппроксимирующей потенциал $V(x, y)$ при $x \to 0, y \to 0$.

В области слабых полей, где $p/q \leq 2$, структура спектра иная (рис. 2, a, b). В области отрицательных энергий в отсутствии магнитного поля уровни энрегии каждой ямы размываются в энергетическую зону, причем, когда минимальное расстояние между точками $a = 25\,\mathrm{nm}$, волновые функции сильно локализованы — реализуются условия сильной связи. Положение трех вырожденных уровней в отдельной яме показано в нижней части рис. 2, a. В магнитном поле каждая такая зона распадается на q подзон, и возникают спектры типа "бабочек" Ховштадтера [6]. Одна такая "бабочка", образовавшаяся из основного уровня потенциальной ямы, хорошо видна в левой части рис. 2, a. Второй и третий уровни потенциальной ямы вырождены, и поэтому при включении магнитного поля соответствующие "бабочки" перекрыты. Необходимо отметить, что система уравнений (5) не обладает свойством периодичности по p/q, и поэтому с ростом магнитного поля (увеличением p/q) картина уровней не повторяется: в интервале $1 \leq p/q \leq 2$ "бабочка" уже не столь ярко выражена.

Для анизотропной прямоугольной решетки квантовых точек картина энергетического спектра представлена на рис. 2, b. Тот факт, что в анизотропной решетке существуют открытые электронные орбиты, отражается и на структуре энергетического спектра. В слабых магнитных полях открытым траекториям соответствует непрерывный спектр. Поэтому "бабочка" в случае анизотропной решетки выглядит более заполненной. Это иллюстрирует рис. 2, b. Расчеты показывают, что в сильных магнитных полях (при $p/q \geq 5$), когда взаимодействие между различными уровнями энергии в магнитном поле оказывается не столь существенным (матрица $V^{N'n'}_{Nm}$ распадается на независимые блоки, соответствующие разным N), энергетический спектр, как и в случае изотропной решетки, состоит из узких подзон, образовавшихся из невозмущенных уровней Ландау.

Поскольку уровни изолированной ямы и интегралы перекрытия, определяющие ширину энергетической зоны в приближении сильной связи, зависят от приложенного

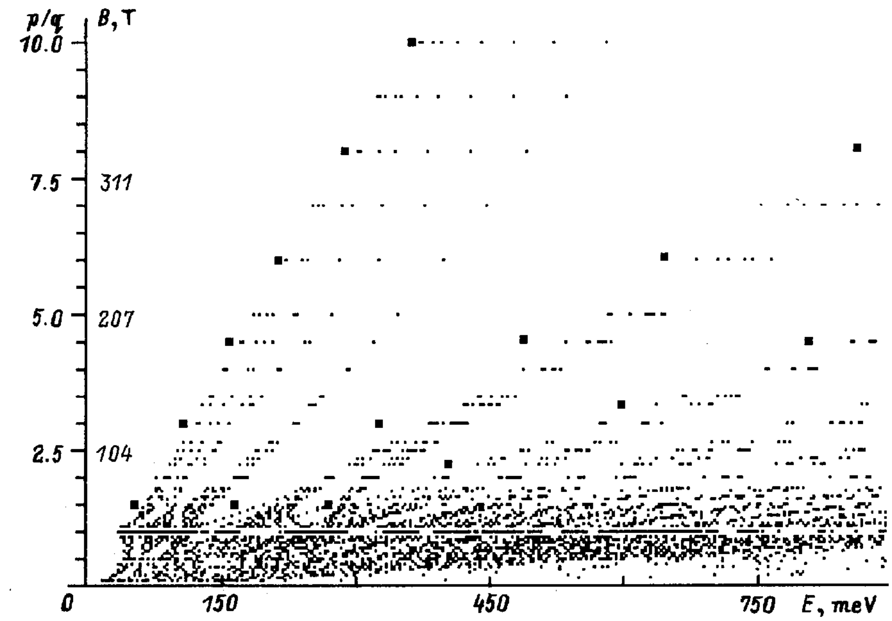

Рис. 3. Магнитные подзоны в квадратной решетке квантовых антиточек, помещенной в магнитном поле ($a = b = 10\,\mathrm{nm}$, $V_0 = -300\,\mathrm{meV}$).

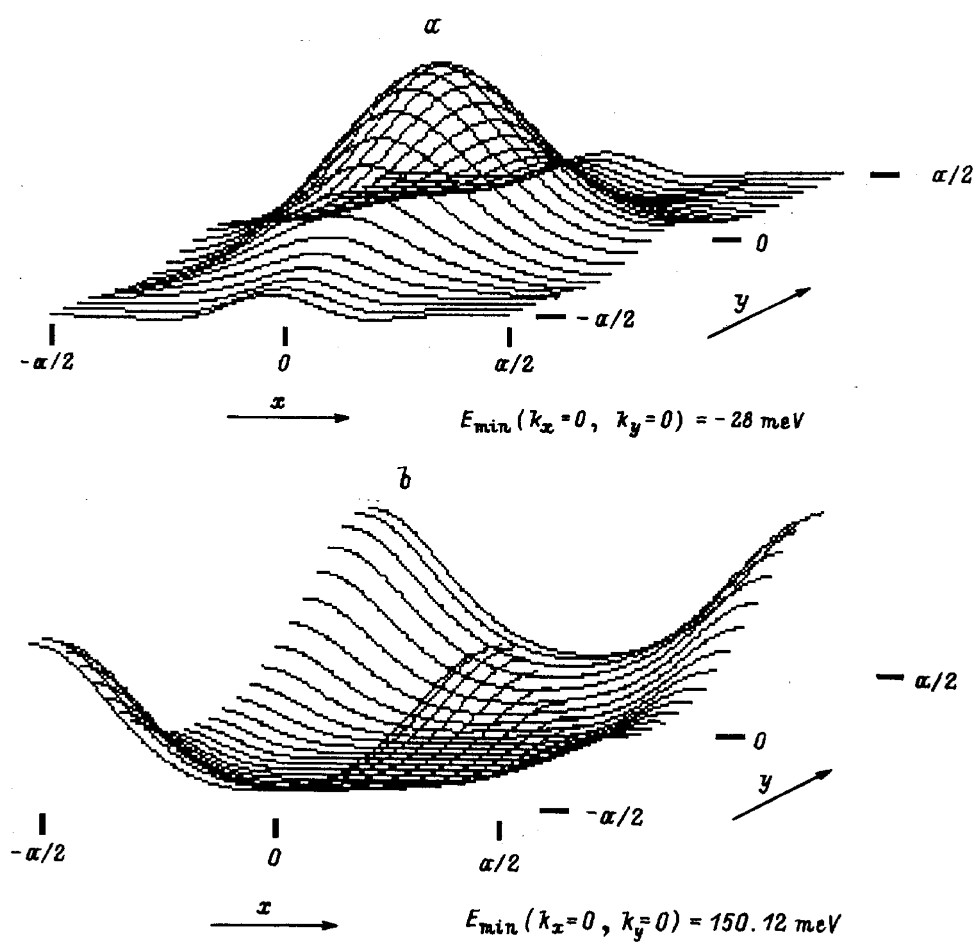

Рис. 4. Распределение электронной плотности для состояния $k_x = k_y = 0$ в первой (низшей) энергетической подзоне в квадратных решетках. *a* — квантовых точек, *b* — квантовых антиточек в магнитном поле, соответствующем $p/q = 4$ ($a = b = 10\,\mathrm{nm}$, $|V_0| = 300\,\mathrm{meV}$).

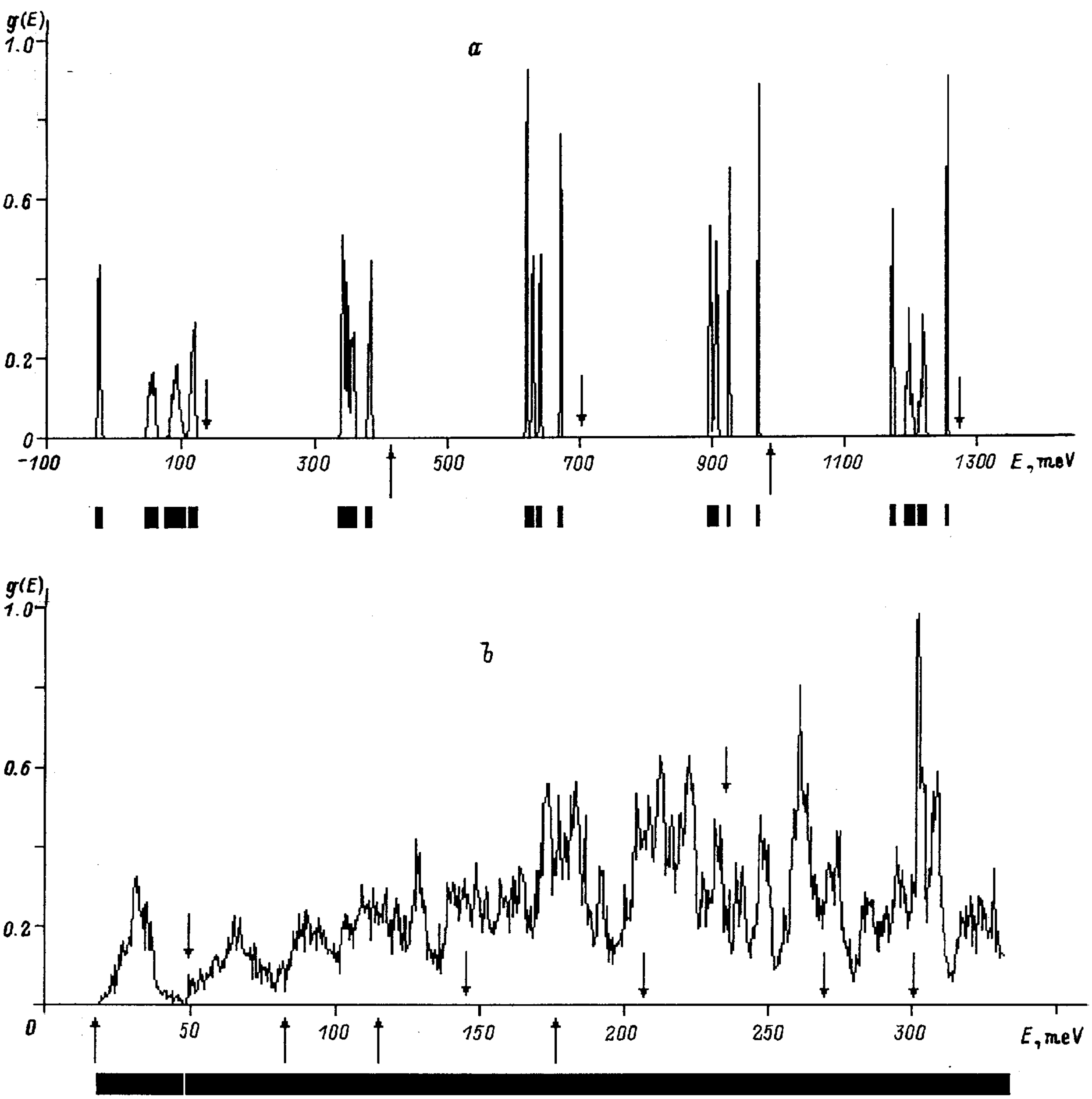

Рис. 5. Плотность электронных состояний в помещенных в магнитное поле решетках квантовых точек ($p/q = 4$, $a = b = 10$ nm, $V_0 = 300$ meV) (a) и квантовых антиточек ($p/q = 4$, $a = b = 30$ nm, $V_0 = -300$ meV) (b).

магнитного поля, при изменении величины последнего границы зоны сдвигаются. С увеличением поля H энергетическая зона, образовавшаяся из уровня энергии основного состояния электрона (рис. 2, b), сдвигается в область больших значений энергии ("бабочка" наклонена). В анизотропной решетке, когда $b < a$, эти эффекты проявляются сильнее, чем в изотропной.

Энергетический спектр электрона в системе квантовых антиточек ($a = b = 10$ nm) в зависимости от магнитного поля представлен на рис. 3. Параметры здесь соответствуют системе $Al_xGa_{1-x}As$–GaAs. Видно, что в области сильных магнитных полей ($p/q \geq 5$) спектр энергий состоит из узких подзон, которые расположены выше невозмущенных уровней Ландау. Положение последних обозначено жирными точками. В магнитном поле, соответствующем $p/q = 10$, параметр $V_0/\hbar\omega_c$ равен 0.4. Поэтому характер спектра энергий здесь такой же, как и в приближении слабой связи. Число подзон под каждым уровнем Ландау равно p.

Метод, использованный в настоящей работе, позволяет также проводить расчет электронных волновых функций. На рис. 4, a, b представлено распределение электронной плотности $|\psi(x, y)|^2$ в нижней энергетической зоне для решеток квантовых точек и антиточек. Видно, что распределение плотности вероятности существенно отлично от нуля либо в области потенциальной ямы (квантовые точки), либо в области между антиточками. Имеет место трансляционная симметрия электронной плотности. Несмотря на то что расчет проводился в несимметричной калибровке, плотность вероятности обладает необходимой симметрией.

Рассчитанная плотность электронных состояний $g(E)$ в решетках квантовых точек и антиточек в магнитном поле представлена на рис. 5. Число квантов магнитного потока на элементарную ячейку было равно $p/q = 4$. Для решетки с периодом $a = b = 10\,\mathrm{nm}$ это соответствует магнитному полю $H \approx 1.6\,\mathrm{MG}$. В столь сильных магнитных полях (рис. 5, a) зависимость плотности состояний от энергии в каждой подзоне имеет форму пагоды, что обусловлено существованием особенностей Ван Хова. Магнитные подзоны здесь хорошо разрешены: вблизи каждого уровня Ландау видны четыре пика плотности состояний. В нижней части рисунков показано положение энергетических подзон. С увеличением периода решетки характер функции $g(E)$ меняется. На рис. 5, b приведен график плотности состояний электрона в системе антиточек. Здесь магнитное поле, равное $H \approx 185\,\mathrm{kG}$, нельзя считать сильным, поскольку отношение $V_0/\hbar\omega_c \approx 10$. Вследствие этого расщепление уровней Ландау велико, и особенности плотности состояний выражены не столь наглядно.

Таким образом, предложенный в настоящей работе численный метод дает возможность изучать электронные состояния двумерного блоховского электрона в магнитном поле в широкой области параметров, включая область сильной и слабой связи. Проведенные расчеты позволяют определить область магнитных полей и параметров поверхностных решеток, состоящих из квантовых точек или антиточек (период, поверхностный потенциал и др.), при которых возможно экспериментальное наблюдение квантовых эффектов, связанных с электронным транспортом и оптическим поглощением в таких системах.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 96-02-18067a), а также Госкомитетом Российской Федерации по высшему образованию (грант 95-0-5, 5-63).

Список литературы

[1] Г.Е. Зильберман. ЖЭТФ **23**, 49 (1952); ЖЭТФ **30**, 1092 (1956); ЖЭТФ **32**, 296 (1957).
[2] J. Zak. Phys. Rev. **A134**, 1602 (1964); Phys. Rev. **A134**, 1607 (1964).
[3] М.Я. Азбель. ЖЭТФ **46**, 929 (1964).
[4] A. Rauh. Phys. Stat. Sol. (b) **65**, K131 (1974); Phys. Stat. Sol. (b) **69**, K9 (1975).
[5] G.H. Wannier. Phys. Stat. Sol. (b) **88**, 757 (1978).
[6] D.R. Hofstadter. Phys. Rev. **B14**, 2239 (1976).
[7] Y. Hasegawa, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, G. Montambaux. Phys. Rev. **B41**, 9174 (1990).
[8] A. Barelli, R. Fleckinger. Phys. Rev. **B46**, 11 559 (1992).
[9] H. Silberbauer. J. Phys.: Condens. Matter **4**, 7355 (1992).
[10] H. Silberbauer, P. Rotter, U. Rössler, M. Suhrke. Europhys. Lett. **31**, 7, 393 (1995).
[11] R. Ferrari. Phys. Rev. **B42**, 4598 (1990).
[12] T. Schlösser, K. Ensslin, J.P. Kotthaus, M. Holland. Semicond. Sci. Technol. **11**, 1582 (1996).
[13] Ж.И. Алферов, Д. Бимберг, А.Ю. Егоров, А.Е. Жуков, П.С. Копьев, Н.Н. Леденцов, С.С. Рувимов, В.М. Устинов, И. Хейденрайх. УФН **165**, 224 (1995).
[14] S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt, U. Gösele, J. Heydenreich, U. Richter, N.N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, P.S. Kop'ev, Zh.I. Alferov. Phys. Rev. **B51**, 14 776 (1995).
[15] В.Д. Селемир, А.Е. Дубинов, И.В. Макаров, К.Е. Михеев. 7-я Междунар. конф. по генерации мегагауссных магнитных полей и родственным экспериментам. Тез. докл. Саратов (1996). С. 23.
[16] М.И. Долотенко, А.С. Овчинников, В.В. Платонов, В.И. Плис, А.И. Попов, О.М. Таценко, А.К. Звездин. Там же. С. 100.
[17] А.Е. Дубинов, К.Е. Михеев, В.Д. Селемир. Там же. С. 103.
[18] В.Я. Демиховский, А.А. Перов. В сб.: Мегагауссная и мегаамперная технология и применения. ВНИИЭФ, Саратов (1997).
[19] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, рядов, сумм и произведений. Наука, М. (1971).