УДК 519.63

Численное исследование спектральных свойств периодического массива квантовых точек с гексагональной решёткой, помещённого в однородное магнитное поле

Гришанов Е. Н., Грязева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Периодические массивы наноразмерных объектов различной структуры в последнее время привлекают пристальное внимание специалистов в качестве источника новых материалов, обладающих уникальными свойствами. Особое внимание уделяется структурам с различной геометрией решётки на основе квантовых точек. Исследователям удалось создать такие массивы как с квадратной [1] так и с гексагональной [2, 3] решёткой и экспериментально изучить их свойства в магнитных полях. В этой связи представляется актуальным построение и исследование свойств математических моделей массивов квантовых точек различной геометрии в магнитных полях.

Будем рассматривать периодический массив квантовых точек на плоскости, помещённый во внешнее перпендикулярное однородное магнитное поле **B**. Для удобства будем отождествлять точки плоскости массива с точками комплексной плоскости $\mathbb{C}$. Тогда решётка периодов массива квантовых точек может быть описана при помощи множества

$$\Omega = \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda = \lambda_1\omega_1 + \lambda_2\omega_2,\ \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{Z}\},$$

где $\omega_1, \omega_2 \in \mathbb{C}$ – образующие решётки. В гексагональном случае решётка Ω будет ромбической с образующими: $\omega_1 = l,\ \omega_2 = le^{\frac{\pi}{3}i}$, а кристаллическая решётка массива $\Gamma = \Omega + K$, где $K = \{0, b\},\ b = \frac{2}{3}(\omega_1 + \omega_2)$. Считаем, что в каждом узле решетки Γ расположена квантовая точка, площадь которой равна $\frac{1}{4}$ площади элементарной ячейки, l – сторона ромба. Через F_λ будем далее обозначать элементарную ячейку, отвечающую $\lambda \in \Omega$.

Выберем векторный потенциал поля **B** в виде

$$A_1(z) = -\frac{B}{2}Im(z),\ A_2(z) = \frac{B}{2}Re(z),\ A_3(z) = 0,\ z \in \mathbb{C}.$$

Тогда гамильтониан свободной заряженной частицы в массиве квантовых точек можно формально записать в виде следующего дифференциального оператора

$$H^0 = \frac{1}{2m*}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(z)\right)^2 + V(z), \tag{1}$$

где m^* – эффективная масса частицы, e – ее заряд, c – скорость света, а $V(z) = \sum\limits_{\gamma\in\Gamma} V_\gamma(z)$ – потенциал конфайнмента массива квантовых точек. Будем считать, что все квантовые точки одинаковы и имеют параболический потенциал конфаймента, тогда $V_\gamma(z) = \dfrac{\hbar^2|z-\gamma|^2}{2m^*d^4}$, где d – характерный размер квантовой точки. Далее будем использовать систему единиц, где $\hbar = e = c = 1$, $m^* = \dfrac{1}{2}$.

Очевидно, что оператор (1) не является самосопряженным. Для построения математической модели воспользуемся процедурой сужения-расширения, предложенной в [4]. Рассмотрим сужение S оператора H^0 на пространство $\mathcal{D} = \bigoplus_{\lambda\in\Omega} C_0^\infty(F_\lambda \setminus \{\lambda + K\})$. Будем искать резольвенту R_A гамильтониана модели H как самосопряжённое расширение S при помощи формулы М. Г. Крейна для резольвент [5]

$$R_A(z) = R_0(z) - B(z)[Q(z) - A]^{-1}B^*(\bar{z}), \tag{2}$$

где R_0 – резольвента невозмущённого оператора, B и Q – $\Gamma-$ и $Q-$ функции Крейна соответственно, A – самосопряжённый оператор в пространстве граничных значений, параметризующий расширения (в нашем случае его можно считать изоморфным $l^2(\Omega)\otimes\mathcal{G}_K$, $\dim\mathcal{G}_K = |K|$). Среди всех расширений нас интересуют только те, которые будут инварианты относительно операторов представления дискретной группы магнитных трансляций по решетке Ω с образующими $T_j\psi(z) = e^{\pi i Im(B\omega_j z)}[\omega_j]\psi(z)$, где $[\cdot]$ – обычная трансляция по решётке. Этот факт даёт нам следующее условие на матрицу оператора A

$$A(\gamma,\gamma') = \exp(\pi i\xi Im(\overline{(\gamma'-\gamma)}(\gamma'-k)))A(\gamma-\gamma'+k,k), \tag{3}$$

где $\gamma,\gamma'\in\Gamma,\ k\in K,\ \xi$ – плотность потока магнитного поля $\mathbf{B}$. Также будем считать, что в рассматриваемой нами модели туннелирование заряженной частицы возможно только в соседнюю квантовую точку, что даёт нам дополнительное условие

$$A(u,b) = \begin{cases} \alpha,\ u = \omega_1,\omega_2,\omega_1+\omega_2, \\ 0, \text{во всех остальных случаях}, \end{cases} \tag{4}$$

α – константа, выбираемая из физических соображений.

В случае рациональных значений магнитного потока $\Phi = N/M (N\in\mathbb{Z}, M\in\mathbb{N})$ через элементарную ячейку решётки Ω возможно провести разложение оператора H в прямой интеграл по спектру неприводимых представлений группы магнитных трансляций и свести исследование спектра оператора H к решению т. н. дисперсионного уравнения

$$\det[\tilde{Q}(\mathbf{p},z) - \tilde{A}(\mathbf{p})] = 0, \tag{5}$$

где $\mathbf{p}\in\mathbb{T}^2_\Phi = [0,1/M)\times[0,1)$, матрицы $\tilde{Q}(\mathbf{p},z)$ и $\tilde{A}(\mathbf{p})$ – самосопряжённые конечной размерности $2M\times 2M$. Блоки матрицы $\tilde{Q}(\mathbf{p},z)$ находим, используя результаты [4] и [6], а элементы $\tilde{A}(\mathbf{p})$ определяем из условий (3) и (4) и результатов [4].

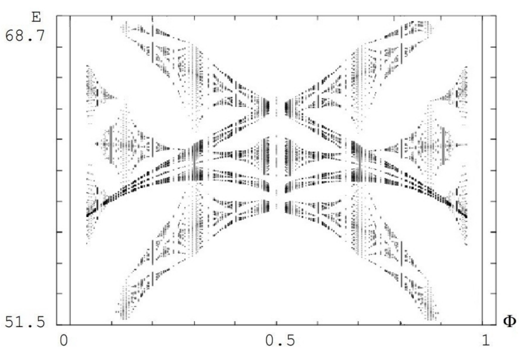

Рис. 1. Диаграмма «поток-энергия» для гексагональной решётки

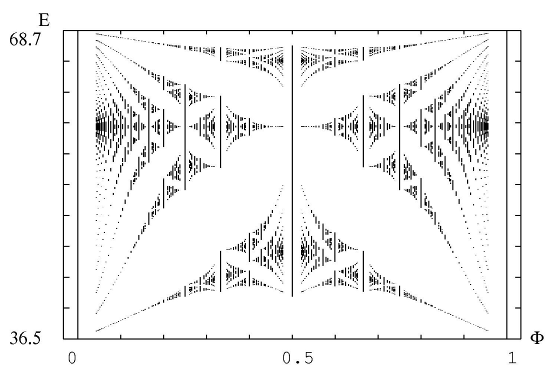

Рис. 2. Диаграмма «поток-энергия» для квадратной решётки

Из (2) ясно, что спектр гамильтониана H модели будет состоять из двух частей: бесконечно вырожденных собственных значений

$$E_{nm} = \sqrt{B^2 + \frac{2}{d^2}(|m| + 1 + 2n)} + Bm, \ (n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{Z}, \quad m \neq 0, -1)$$

гамильтониана одиночной квантовой точки, и решений уравнения (5). Поскольку матрицы $\tilde{A}$ и $\tilde{Q}$ получены в явном виде, для решения уравнения (5) можно использовать стандартные численные методы линейной алгебры. В результате проведённых вычислений для $\alpha = 0.1$ была получена диаграмма зависимости энергии E заряженной частицы от потока Φ однородного магнитного поля в моделируемой системе, приведённая на рис. 1. Из диаграммы видно, что для рациональных значений потока Φ каждая из зон спектра распадается на $2M$ подзон. Сравнение с аналогичной диаграммой для квадратной решётки (рис. 2) показывает, что в ширина зон становится меньше, число лакун в спектре увеличивается. Особенно отчётливо это заметно при $\Phi = 1/2$, где в случае квадратной решётки вообще отсутствуют лакуны в зоне проводимости. Кроме того, существенно меняется сама структура спектра.

Полученный результат показывает, что геометрия решётки оказывает значительное влияние на спектральные свойства периодического массива квантовых точек в однородном магнитном поле.

Литература

1. Micro and Nano Fabrication Technology. Springer. 2018. Vol. 1. 957 p.

2. Tianxiao Nie, Xufeng Kou at al. Superlattice of Fe_xGe_{1-x} nanodots and nanolayers for spintronics application // Nanotechnology. 2014. Vol. 25. 505702.

3. Jong-Ryul Jeong, Sarah Kim at al. Fabrication of Hexagonal Lattice Co/Pd Multilayer Nanodot Arrays Using Colloidal Lithography// Small. 2007. Vol. 3, No. 9. pp. 1529-1533.

4. Geyler V. A., Pavlov B. S., Popov I. Yu. One-Particle Spectral Problem for Superlattice with a Constant Magnetic Field // Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena. – 1998. – Vol. XLVI. – pp. 79–124.

5. Крейн М. Г., Об эрмитовых операторах с дефект-индексами, равными единице // Докл. АН СССР. – 1944. – Т. XLII, № 8. – С. 57–63.

6. Попов А. В. Спектральные свойства периодических массивов квантовых точек и колец в магнитном поле: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. – Саранск, 2000. – 179 с.

MSC2020 35Q40

Numerical Analysis of the Spectral Properties of Quantum Dots Array with Hexagonal Lattice in a Uniform Magnetic Field

E. N. Grishanov, O. S. Gryazeva

National Research Mordovia State University