

УДК 537.311.33

КВАНТОВАЯ ЯМА НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА И УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

П. В. Ратников¹, А. П. Силин

Рассмотрен энергетический спектр планарной квантовой ямы, образованной из двух полосок узкощелевых полупроводников и вставленной между ними полоской графена. Показано, что бесщелевая мода появляется только в случае инвертированных узкощелевых полупроводников. С учетом специфики графена рассчитано спиновое расщепление энергетического спектра несимметричной квантовой ямы. Исследованы приграничные состояния и оптические переходы. Показано, что оптические переходы возможны только с сохранением четности.

После первого экспериментального исследования графена – одноатомного слоя атомов углерода, образующих правильную гексагональную решетку [1, 2], возникла интенсивная деятельность в разных направлениях. В частности, за последние три года выполнено множество работ по электронным свойствам узких полосок графена нанометровых масштабов (нанополосок). Одними из первых были работы по изучению электронных состояний полосок графена с использованием уравнения Дирака с соответствующими граничными условиями [3, 4]. Электронные свойства нанополоски графена сильно зависят от ее размера и геометрии, а также от того, осажжены ли атомы водорода на свободных атомных орбиталях атомов углерода на ее краях [5]. По своим транспортным свойствам нанополоски графена во многом напоминают углеродные нанотрубки, так как в обоих случаях свободное движение одномерно [6, 7].

¹ratnikov@lpi.ru

Граничные условия для нанотрубок, носители тока в которых описываются уравнением Дирака, подробно обсуждались в работе [8]. Два типа граничных условий соответствуют двум типам краев полосы графена: зигзаг и “кресло” (armchair) [3]. Для нанополосок графена с первым типом краев характерно возникновение поверхностных состояний нулевой энергии. Для второго типа краев энергетический спектр бесщелевой (металлический), когда ширина полосы $d = (3M + 1)a$, где M – натуральное число, $a = \sqrt{3}a_0$ – постоянная решетки (a_0 – межатомное расстояние), и диэлектрический для других ширин [4].

Недавно был сделан транзистор на основе нанополоски графена шириною 2 нм и длиной 236 нм (исследовались также нанополоски с шириной 10–60 нм) [9]. Нанополоска графена была взята настолько узкой, чтобы гарантировать большую полупроводниковую щель для работы транзистора при комнатной температуре. Однако по компактности он несколько проигрывает транзистору на основе графеновой квантовой точки диаметром 30 нм [10].

В работе [11] в приближении сильной связи исследован планарный контакт нанополоски графена с краями типа зигзаг с полосками металла. В нашей работе рассмотрено возникновение размерного квантования безмассовых носителей тока в нанополоске графена с краями типа “кресла” с шириной $d \neq (3M + 1)a$, окруженной полосками узкощелевых полупроводников. Меняя узкощелевые полупроводники, можно менять высоту потенциальных барьеров, являющихся запрещенными зонами узкощелевых полупроводников, что открывает дополнительные возможности для зонной инженерии [12].

Для уединенной нанополоски графена высота потенциальных барьеров была вычислена в работе [13] в приближении локальной спиновой плотности. Она оказалась равной 2.33 эВ для края типа “кресла” и 3.33 эВ для края типа зигзаг. Эти величины на порядок больше характерной ширины запрещенной зоны узкощелевого полупроводника.

Мы проводим вычисления в рамках модели Дирака [14]. Направим ось x параллельно границам раздела узкощелевых полупроводников и графена, ось y – перпендикулярно плоскости гетероструктуры и ось z перпендикулярно осям x и y (рис. 1). В двузонном приближении гетероструктура, составленная из узкощелевых полупроводников² и графена, описывается уравнением Дирака. Полуширина запрещенной зоны Δ , работа выхода V и матричный элемент скорости межзонных переходов u постоянны и изменя-

²В качестве узкощелевого полупроводника можно использовать и щелевую модификацию графена [15].

ются только на границах гетероструктуры. В данном случае для выбранной ориентации осей уравнение Дирака имеет следующий вид:

$$\hat{H}_D \Psi \equiv \{u_i \gamma^0 \gamma^1 \hat{p}_x + u_i \gamma^0 \gamma^3 \hat{p}_z + \gamma^0 \Delta_i + V_i\} \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

где $\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, $\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ – γ -матрицы Дирака; I – единичная матрица 2×2 ; $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули; $\hat{p} = -i\vec{\nabla}$ – оператор импульса, $\hbar = 1$.

Легко проверить, что с гамильтонианом \hat{H}_D коммутирует оператор³:

$$\hat{P} = i\gamma^0 \gamma^3 \gamma^1. \quad (2)$$

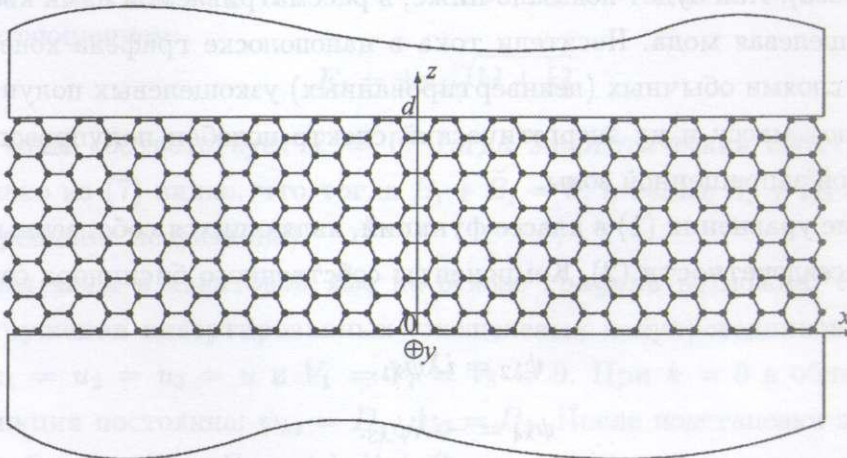


Рис. 1. Рассматриваемая гетероструктура: нанополоска графена вставлена между двумя полосками узкощелевых полупроводников (здесь ось y направлена от нас; атомная структура узкощелевого полупроводника не показана).

Чтобы выяснить смысл оператора \hat{P} , представим его в виде:

$$\hat{P} = i\gamma^0 \hat{\Lambda}_y, \quad (3)$$

³Следует отличать оператор \hat{P} от оператора спиральности \hat{h} , введенного для неограниченного графена [16], который является оператором проекции псевдоспина на импульс свободного движения. В планарной гетероструктуре свободное движение одномерно, а одномерный оператор \hat{h} (записанный в матричной форме 4×4) не коммутирует с \hat{H}_D . Значит, собственное число \hat{h} не сохраняется. Сохраняющимся квантовым числом является собственное число оператора \hat{P} .

где $i\gamma^0$ – оператор пространственного отражения; $\hat{\Lambda}_y = e^{-i\frac{\pi}{2}\Sigma_y} = -i\Sigma_y$ – оператор вращения вокруг оси y на угол π (см., например, [17]); $\Sigma_y = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}$. Отсюда видно, что оператор \hat{P} играет роль оператора псевдочетности, введенного при рассмотрении узкощелевых слоистых гетероструктур [18].

Собственные значения $\lambda = \pm 1$ оператора \hat{P} определяют знак проекции спина на ось y , в чем можно убедиться, подсчитав среднее значение спина аналогично тому, как это сделано в статье [18]. В дальнейшем λ будем называть четностью состояния. Как отмечалось в предыдущей нашей работе [19], носители тока в графене являются киральными безмассовыми дираковскими фермионами (спин частицы направлен по или против ее импульса). Как будет показано ниже, в рассматриваемой нами квантовой яме отсутствует бесщелевая мода. Носители тока в нанополоске графена конечной ширины, окруженной слоями обычных (неинвертированных) узкощелевых полупроводников, эффективно имеют массу и их энергетический спектр подобен полупроводниковому с конечной шириной запрещенной зоны.

Ищем решение уравнения (1) в классе функций, являющихся собственными функциями оператора псевдочетности (2). Компоненты собственного биспинора связаны соотношениями:

$$\begin{aligned}\psi_{\lambda 2} &= i\lambda\psi_{\lambda 1}, \\ \psi_{\lambda 4} &= -i\lambda\psi_{\lambda 3}.\end{aligned}\quad (4)$$

Теперь уравнение Дирака (1) запишется в виде:

$$\left\{ u_i \gamma^0 \gamma^3 \hat{p}_z - i\lambda \gamma^3 u_i k_x + \gamma^0 \Delta_i + V_i \right\} \Psi_\lambda = E_\lambda \Psi_\lambda. \quad (5)$$

Две независимые компоненты собственного биспинора удовлетворяют системе двух дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\left(-iu_i \frac{d}{dz} + i\lambda u_i k_x \right) \psi_{\lambda 1} &= (E_\lambda + \Delta_i - V_i) \psi_{\lambda 3}, \\ \left(-iu_i \frac{d}{dz} - i\lambda u_i k_x \right) \psi_{\lambda 3} &= (E_\lambda - \Delta_i - V_i) \psi_{\lambda 1}.\end{aligned}\quad (6)$$

Решение ищем в трех областях в виде:

- 1) $z < 0$: $\psi_{\lambda 1} = A_1 e^{k_1 z}$, $\psi_{\lambda 3} = A_3 e^{k_1 z}$,
- 2) $0 < z < d$: $\psi_{\lambda 1} = B_1 e^{ikz} + \tilde{B}_1 e^{-ikz}$, $\psi_{\lambda 3} = B_3 e^{ikz} + \tilde{B}_3 e^{-ikz}$,

3) $z > d$: $\psi_{\lambda 1} = C_1 e^{-k_3 z}$, $\psi_{\lambda 3} = C_3 e^{-k_3 z}$, соответственно для узкощелевого полупроводника с Δ_1, V_1, u_1 , графена с $\Delta_2 = 0, V_2 = 0, u_2$ и узкощелевого полупроводника с Δ_3, V_3, u_3 .

Используя граничные условия непрерывности $\sqrt{u}\Psi$ [20], можно исключить постоянные $A_1, A_3, C_1, C_3, B_3, \tilde{B}_3$ и получить систему уравнений на коэффициенты B_1 и \tilde{B}_1 ⁴

$$\left(\frac{u_2 k + i\lambda u_2 k_x}{E_\lambda} + \frac{i u_1 k_1 - i\lambda u_1 k_x}{E_\lambda + \Delta_1 - V_1} \right) B_1 + \left(\frac{-u_2 k + i\lambda u_2 k_x}{E_\lambda} + \frac{i u_1 k_1 - i\lambda u_1 k_x}{E_\lambda + \Delta_1 - V_1} \right) \tilde{B}_1 = 0,$$

$$\left(\frac{u_2 k + i\lambda u_2 k_x}{E_\lambda} - \frac{i u_3 k_3 + i\lambda u_3 k_x}{E_\lambda + \Delta_3 - V_3} \right) B_1 e^{ikd} + \left(\frac{-u_2 k + i\lambda u_2 k_x}{E_\lambda} - \frac{i u_3 k_3 + i\lambda u_3 k_x}{E_\lambda + \Delta_3 - V_3} \right) \tilde{B}_1 e^{-ikd} = 0. \quad (7)$$

Зависимость энергии от разрешенного импульса k и импульса свободного движения k_x дается соотношением:

$$E_\lambda = \pm u_2 \sqrt{k^2 + k_x^2}. \quad (8)$$

Бесщелевой моде соответствует $k = 0$. Тогда энергетический спектр линейен $E_\lambda = \pm u_2 |k_x|$. Однако из (7) видно, что тогда $B_1 + \tilde{B}_1 = 0$, а также $B_3 + \tilde{B}_3 = 0$, что значит $\Psi_\lambda \equiv 0$ (это решение не физично).

Бесщелевая мода в квантовой яме на основе графена возможна, если графен находится в окружении инвертированных узкощелевых полупроводников [21], в которых $\Delta_1 \Delta_3 < 0$, $u_1 = u_2 = u_3 = u$ и $V_1 = V_2 = V_3 = 0$. При $k = 0$ в области $0 < z < d$ волновая функция постоянна: $\psi_{\lambda 1} = D_1$, $\psi_{\lambda 3} = D_3$. После подстановки этого решения в (6) получаем $D_3 = \pm i D_1$ и $E_\lambda = \pm \lambda u |k_x|$. Сшивая решения на границах $z = 0$ и $z = d$, находим волновую функцию:

$$1) \Psi_\lambda^{(\pm)} = C \tilde{\Psi}_\lambda^{(\pm)} e^{\mp \frac{\Delta_1}{u} z},$$

$$2) \Psi_\lambda^{(\pm)} = C \tilde{\Psi}_\lambda^{(\pm)},$$

$$3) \Psi_\lambda^{(\pm)} = C \tilde{\Psi}_\lambda^{(\pm)} e^{\mp \frac{\Delta_3}{u} (z-d)},$$

где введен биспинор

$$\tilde{\Psi}_\lambda^{(\pm)} = \begin{pmatrix} 1 \\ i\lambda \\ \pm i \\ \pm \lambda \end{pmatrix}.$$

⁴ Система уравнений на B_3 и \tilde{B}_3 аналогична (7).

Константа C определяется из условия нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \Psi_{\lambda}^{\dagger} \Psi_{\lambda} = 1, \quad (9)$$

$$C = \frac{1}{2} \left[\frac{u}{2} \left(\frac{1}{|\Delta_1|} + \frac{1}{|\Delta_3|} \right) + d \right]^{-1/2}.$$

Случай $D_3 = iD_1$ соответствует $\Delta_1 < 0$, $\Delta_3 > 0$ и $E_{\lambda} = \lambda u k_x$; для $D_3 = -iD_1$ получаем $\Delta_1 > 0$, $\Delta_3 < 0$ и $E_{\lambda} = -\lambda u k_x$.

Ниже рассматривается случай неинвертированных узкощелевых полупроводников с $\Delta_{1,3} > 0$, когда бесщелевой моды нет. Легко получить уравнение на k , аналогичное уравнению, исследованному в работах [22, 23]

$$\operatorname{tg} kd = \frac{A(C + \tilde{C})}{1 + B(C - \tilde{C}) - C\tilde{C}}, \quad (10)$$

где

$$A = \frac{u_2 k}{E_{\lambda}}, \quad B = \frac{\lambda u_2 k_x}{E_{\lambda}}, \quad C = \frac{u_1 k_1 - \lambda u_1 k_x}{E_{\lambda} + \Delta_1 - V_1}, \quad \tilde{C} = \frac{u_3 k_3 + \lambda u_3 k_x}{E_{\lambda} + \Delta_3 - V_3},$$

$$u_1^2 k_1^2 = \Delta_1^2 - (E_{\lambda} - V_1)^2 + u_1^2 k_x^2, \quad u_2^2 k^2 = (E_{\lambda} - V_2)^2 - \Delta_2^2 - u_2^2 k_x^2, \quad u_3^2 k_3^2 = \Delta_3^2 - (E_{\lambda} - V_3)^2 + u_3^2 k_x^2.$$

В общем случае уравнение (10) довольно громоздко, поэтому мы ограничимся рассмотрением частных случаев для определенных типов квантовых ям.

Симметричная квантовая яма. Симметричной квантовой ямой назовем такую квантовую яму, в которой $V_1 = V_3 = V$, $\Delta_1 = \Delta_3 = \Delta$, $\Delta_2 = 0$, $V_2 = 0$, $u_1 = u_3 = \bar{u}$, $u_2 = u$. Уравнение (10) приводится к виду:

$$\operatorname{tg} kd = \frac{u \bar{u} k_1 k}{E(E - V) - u \bar{u} k_x^2}. \quad (11)$$

Зависимость энергии от λ пропадает, поэтому расщепления по четности нет. Наиболее простой вид уравнение (11) принимает при $V = 0$ и $u = \bar{u}$

$$\operatorname{tg} kd = \frac{\sqrt{\Delta^2 - u^2 k^2}}{uk}. \quad (12)$$

Из последнего уравнения можно легко найти число ветвей в спектре размерного квантования $n_{e(h)}$ в электронном (дырочном) спектре (в данном случае $n_e = n_h = n$). Это

число должно быть таким, чтобы выполнялось неравенство⁵

$$\pi(n-1) \leq \frac{d\Delta}{u} < \pi n. \quad (13)$$

Из графического решения уравнения (12) видно, что остается в силе теорема нерелятивистской квантовой механики, утверждающая, что в сколь угодно мелкой одномерной симметричной квантовой яме всегда есть хотя бы один уровень⁶.

Несимметричная квантовая яма первого типа. Так мы называем квантовую яму с $\Delta_1 = \Delta_3 = \Delta$, $\Delta_2 = 0$, $V_1 = -V_3 = V$, $V_2 = 0$, $u_1 = u_3 = \bar{u}$, $u_2 = u$. Тогда в уравнении (10) явно входит λ в виде комбинации λk_x . Следовательно, возникает расщепление по четности (спиновое расщепление). Экстремумы энергетического спектра не совпадают с $k_x = 0$ и лежат при $k_x = \lambda k_x^*$. Следовательно, энергия зависит от $k_x - \lambda k_x^*$. Будем считать отклонение от симметричной квантовой ямы малым: $|V| \ll \Delta$. В низшем порядке по V зависимость энергии от импульса k_x дается выражением (8)

$$E_\lambda^{(0)} = \pm u \sqrt{k^{(0)2} + k_x^2}, \quad (14)$$

где $k^{(0)}$ – корень уравнения (11) при $V = 0$

$$\operatorname{tg} k^{(0)} d = \frac{k^{(0)} \sqrt{\Delta^2 - u^2 k^{(0)2} + (\bar{u}^2 - u^2) k_x^2}}{u k^{(0)2} + (u - \bar{u}) k_x^2}. \quad (15)$$

В следующем порядке по V имеем⁷

$$E_\lambda^{(1)} = \pm u \sqrt{k^{(0)2} + (k_x - \lambda k_x^*)^2}. \quad (16)$$

С той же точностью значение экстремума $\pm u k^{(0)}$ при $k_x = \lambda k_x^*$ совпадает со значением экстремума при $k_x = 0$ в симметричной квантовой яме, а разница между ними δE – величина более высокого порядка малости: $|\delta E| \ll u |k_x^*| \ll \Delta$. Раскладывая (15) до

⁵Интересно отметить, что есть решение уравнения (12) в случае $\frac{d\Delta}{u} = \pi n$, что соответствует уровню, лежащему на границе с непрерывным спектром.

⁶В несимметричной квантовой яме, как и в нерелятивистском случае (см., например, [24]), может и не быть ни одного уровня.

⁷В работе [22] использована квадратичная зависимость энергии от импульса, которая верна при больших значениях Δ_2 .

величин второго порядка малости и сохраняя члены с k_x^{*2} и k_x^*V как члены одинаковой малости, получаем

$$k_x^* = \frac{V}{\bar{u}} \cdot \frac{\Delta}{F} \cdot \left[1 + \sqrt{1 + \frac{u\bar{u}k_0^2}{(\Delta^2 - u^2k_0^2)^{3/2}} F} \right], \quad (17)$$

где $F = 2\sqrt{\Delta^2 - u^2k_0^2} + \frac{u\bar{u}k_0^2}{\sqrt{\Delta^2 - u^2k_0^2}}$.

Несимметричная квантовая яма второго типа. Так мы называем квантовую яму с $\Delta_1 \neq \Delta_3$, $V_1 = V_3 = V$, $V_2 = 0$, $\Delta_2 = 0$, $u_1 = u_3 = \bar{u}$, и $u_2 = u$. Будем считать отклонение от симметричной квантовой ямы малым: $\Delta_1 - \Delta_3 = 2\Delta'$, $|\Delta'| \ll \Delta_{1,3}$. Удобно ввести полусумму щелей $\tilde{\Delta} = \frac{\Delta_1 + \Delta_3}{2}$, а щели выражать через $\tilde{\Delta}$ и Δ' : $\Delta_1 = \tilde{\Delta} + \Delta'$, $\Delta_3 = \tilde{\Delta} - \Delta'$.

Аналогично первому типу квантовой ямы, приближенное решение ищем в виде:

$$\tilde{E}_\lambda^{(1)} = \pm u \sqrt{\tilde{k}^{(0)2} + (k_x - \lambda k_x^*)^2}, \quad (18)$$

где $\tilde{k}^{(0)}$ – корень уравнения для симметричной квантовой ямы (11), в котором вместо Δ взята величина $\tilde{\Delta}$. Далее, рассуждая по аналогии с предыдущим случаем, можно получить формулу:

$$k_x^* = -\frac{\Delta'}{\bar{u}} \cdot \frac{b + \sqrt{b^2 + ac}}{a}, \quad (19)$$

где введены обозначения: $a = 2(\tilde{\Delta} + u\tilde{k}_0 - V)\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - (u\tilde{k}_0 - V)^2} + \bar{u}\tilde{k}_0(u\tilde{k}_0 - V)\sqrt{\frac{\tilde{\Delta} + u\tilde{k}_0 - V}{\tilde{\Delta} - u\tilde{k}_0 + V}}$,
 $b = ((\bar{u} - u)\tilde{k}_0 + V)(\tilde{\Delta} + u\tilde{k}_0 - V)$, $c = \bar{u}\tilde{k}_0(u\tilde{k}_0 - V)\frac{2\tilde{\Delta}^2 - (u\tilde{k}_0 - V)^2}{(\tilde{\Delta} - u\tilde{k}_0 + V)\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - (u\tilde{k}_0 - V)^2}}$; \tilde{k}_0 – корень уравнения (11) при $k_x = 0$ (мы пренебрегли зависимостью $\tilde{k}^{(0)}$ от k_x).

Приграничные состояния. Впервые приграничные состояния были предсказаны И. Е. Таммом в 1932 году [25]. Эти состояния локализованы вблизи границ раздела узкощелевого полупроводника и графена⁸. В областях $z < 0$ и $z > d$ решение ищется в том

⁸Отметим, что аналогичные состояния возникают и в одиночном гетероконтакте с пересечением дисперсионных кривых [23, 26]. Они не являются спецификой квантовой ямы и могут возникать также и в квантовых барьерах [7].

же виде, что и для состояний размерного квантования, а в области квантовой ямы в виде:

$$\psi_{\lambda 1} = B_1 e^{-qz} + \tilde{B}_1 e^{qz}, \quad \psi_{\lambda 3} = B_3 e^{-qz} + \tilde{B}_3 e^{qz}.$$

Величина q связана с E_λ соотношением:

$$E_\lambda^2 = u_2^2 k_x^2 - u_2^2 q^2, \quad (20)$$

поэтому условием существования приграничных состояний является неравенство⁹

$$|q| \leq |k_x|. \quad (21)$$

Уравнение на q аналогично (10) с той лишь разницей, что вместо tgkd стоит thqd , и в A вместо k входит q .

Т а б л и ц а 1

Результаты анализа решений уравнения на q для приграничных состояний с $|q| \leq |k_x|$

	Нет приграничных состояний	Есть приграничные состояния только одной четности	Есть приграничные состояния обеих четностей
Электроны	$\begin{cases} p_1 > 1 \\ p_3 > 1 \end{cases}$	$\begin{matrix} \lambda = +1 & \lambda = -1 \\ \begin{cases} p_1 \geq 1 \\ p_3 \leq 1 \end{cases} & \begin{cases} p_1 \leq 1 \\ p_3 \geq 1 \end{cases} \\ p_1 \neq p_3 \end{matrix}$	$\begin{cases} p_1 < 1 \\ p_3 < 1 \end{cases}$
Дырки	$\begin{cases} p_1 < 1 \\ p_3 < 1 \end{cases}$	$\begin{matrix} \lambda = +1 & \lambda = -1 \\ \begin{cases} p_1 \leq 1 \\ p_3 \geq 1 \end{cases} & \begin{cases} p_1 \geq 1 \\ p_3 \leq 1 \end{cases} \\ p_1 \neq p_3 \end{matrix}$	$\begin{cases} p_1 > 1 \\ p_3 > 1 \end{cases}$

Введены обозначения $p_1 = \sqrt{\frac{\Delta_1 + V_1}{\Delta_1 - V_1}}$, $p_3 = \sqrt{\frac{\Delta_3 + V_3}{\Delta_3 - V_3}}$. Особый случай $p_1 = p_3 = 1$ соответствует отсутствию приграничных состояний при малых k_x как для электронов, так и для дырок (см. подробнее текст).

⁹Неравенство такого вида рассматривалось в работе [11], где вместо термина "приграничные состояния" использовался термин "исчезающие моды" (evanescent modes).

Для того чтобы неравенство (21) выполнялось для всех значений k_x , необходимо, чтобы при $k_x \rightarrow 0$ решение этого уравнения $q \rightarrow 0$. В противном случае либо приграничные состояния существуют, начиная с некоторого критического импульса свободного движения, либо они не существуют. Легко показать, что в случае $q(k_x) \neq \text{const}$ нет такой точки $k_{x0} \neq 0$, чтобы $|q(k_{x0})| = |k_{x0}|$. При $k_x \neq 0$ график функции $|q(k_x)|$ лежит либо ниже прямой $q = |k_x|$ (приграничные состояния есть), либо выше прямой $q = |k_x|$ (приграничных состояний нет). Анализ решения уравнения на q при малых k_x представлен в таблице 1.

В частности, возможно существование приграничных состояний одной четности, следствием чего является спиновый ток при отличном от нуля электрическом токе вдоль границы. Указанный эффект может быть использован в спинтронике [27].

Могут существовать приграничные состояния для носителей тока одного знака заряда. Приграничные состояния энергетически выгоднее состояний размерного квантования, что приводит к заполнению приграничных состояний носителями тока. Таким образом, при оптическом возбуждении возможен случай, когда заряд одного знака будет локализован вдоль границ раздела на фоне однородно распределенного заряда противоположного знака.

Недавно в рамках электростатического приближения было показано, что при приложении электрического поля перпендикулярно плоскости уединенной нанополоски графена на подложке возникает заряд на границах нанополоски [28]. Мы считаем, что в рассматриваемой гетероструктуре также возможен подобный эффект, обусловленный преимущественным заселением приграничных состояний.

Случай $p_1 = p_3 = 1$ ($\Delta_1 = \Delta_3$ и $V_1 = V_3 = 0$) соответствует отсутствию приграничных состояний при малых k_x как для электронов, так и для дырок. Приграничные состояния обеих четностей могут существовать при $|k_x| > k_{xc}$. Рассмотрим сначала случай $u_1 = u_2 = u_3 = u$. Тогда из (12) легко получить

$$\text{th}qd = -\frac{\sqrt{\Delta^2 + u^2q^2}}{uq}, \quad (22)$$

правая часть (22) отрицательна и уравнение (22) не имеет решений. Поэтому существование приграничных состояний в случае $p_1 = p_3 = 1$ возможно только при $u \neq \bar{u}$ и $|k_x| > k_{xc}$.

Проанализируем теперь возникновение приграничных состояний при изменении ширины квантовой ямы d . При уменьшении d они могут исчезнуть при некоторой критической ширине d_c , так что при $d \leq d_c$ приграничных состояний нет.

Определим критерий существования приграничных состояний при определенной ширине d . Уравнение на q имеет вид:

$$\operatorname{th}x = f(x), \quad (23)$$

где $x = qd$ и $f(x)$ при больших x выходит на асимптотику $f(x) \simeq x$. Для существования решения уравнения (23) достаточно, чтобы выполнялось следующее двойное неравенство:

$$0 < f'(0) < 1. \quad (24)$$

В общем случае несимметричной квантовой ямы неравенство (23) аналитически разрешить не удастся, поэтому приведем результаты для симметричной квантовой ямы.

Рассмотрим случай симметричной квантовой ямы с $V = 0$, что соответствует $p_1 = p_3 = 1$. Приграничные состояния возникают только при $u > \bar{u}$, в противном случае $f'(0) < 0$. Видно, что выполняется качественный критерий существования приграничных состояний – пересечение дисперсионных кривых зоны проводимости и валентной зоны узкощелевого полупроводника с дисперсионными прямыми графена [26]. Следует ожидать, что в этом случае приграничные состояния существуют и для электронов, и для дырок. Как отмечалось выше, приграничные состояния возникают при импульсах свободного движения, больших некоторого критического импульса:

$$|k_x| > k_{xc} = \frac{1}{\sqrt{2}d} \sqrt{\frac{u + \bar{u}}{u - \bar{u}}} \left\{ \sqrt{1 + \frac{4d^2\Delta^2}{(u + \bar{u})^2}} - 1 \right\}^{1/2}. \quad (25)$$

Приграничные состояния существуют, если выполняется неравенство $|q(k_{xc})| < |k_x|$, что вместе с условием отсутствия пересечения $|q(k_x)|$ с прямой $q = |k_x|$ обеспечивает выполнение неравенства (21) во всей области $|k_x| > k_{xc}$.

Тот факт, что приграничные состояния начинаются с некоторого критического импульса свободного движения, качественно согласуется с результатом, полученным при рассмотрении случая $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3$ и $V_1 = V_2 = V_3$ в работе [29].

Рассмотрим теперь случай $V \neq 0$ при $u = \bar{u}$. Приграничные состояния возникают при $E_\lambda V < 0$. Для электронов они есть, когда $V < 0$, т.е. $p_1 = p_3 < 1$; для дырок при $V > 0$, т.е. $p_1 = p_3 > 1$. При этом пересекаются дисперсионные прямые графена либо с дисперсионными кривыми зоны проводимости узкощелевого полупроводника (есть приграничные состояния электронов), либо с дисперсионными кривыми валентной зоны (есть приграничные состояния дырок). Критический импульс имеет вид:

$$k_{xc} = \frac{1}{d^2|V|} \left(-u + \sqrt{u^2 + (\Delta^2 - V^2)d^2} \right). \quad (26)$$

Оптические переходы. В присутствии электромагнитной волны $\vec{A} = \vec{e}Ae^{i(\vec{q}\vec{r} - \omega t)}$, где \vec{e} – вектор поляризации электромагнитной волны, уравнение Дирака принимает вид:

$$\left\{ u_i \gamma^0 \vec{\gamma} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \gamma^0 \Delta_i + V_i \right\} \Psi = i \frac{\partial}{\partial t} \Psi. \quad (27)$$

Оператор $\hat{O} = -\frac{e}{c} u_i \gamma^0 \vec{\gamma} \vec{A}$ рассматривается как возмущение. Матричный элемент этого оператора выражается через матричный элемент скорости $v = \vec{e}\vec{v}$ для межзонного перехода из валентной зоны в зону проводимости $E_\lambda \rightarrow E'_\lambda$, [18]

$$\vec{v} = u_i \langle \Psi_\lambda | \gamma^0 \vec{\gamma} | \Psi_\lambda \rangle, \quad (28)$$

где под u_i понимается, что при вычислении (28) подставляются u_1 для $z < 0$, u_2 для области $0 < z < d$, u_3 для $z > d$.

Вычисление матричного элемента скорости по формуле (28) для состояний размерного квантования дает

$$v_x = 2\lambda \delta_{\lambda\lambda'} A_1^* A_1 \left\{ i(a^* - a) \frac{u_1}{2k_1} + iu_2 \left[(b_+^* b - b_+ b^* + f^* f (b^* b_- - b b_-^*)) d + (f^* b^* b_+ + f^* b^* b_-) \frac{e^{2ikd} - 1}{2ik} - (f b_+^* b + f b^* b_-) \frac{1 - e^{-2ikd}}{2ik} \right] + i(c^* \tilde{c} - c \tilde{c}^*) \frac{u_3}{2k_3} e^{-2k_3 d} \right\}, \quad (29)$$

$$v_z = 2\delta_{\lambda\lambda'} A_1^* A_1 \left\{ (a + a^*) \frac{u_1}{2k_1} + u_2 \left[(b^* b_+ + b b_+^* - f^* f (b^* b_- + b_- b^*)) d + (f^* b^* b_- - f^* b^* b_+) \frac{e^{2ikd} - 1}{2ik} + (f b^* b_- - f b_+^* b) \frac{1 - e^{-2ikd}}{2ik} \right] + (c^* \tilde{c} + \tilde{c}^* c) \frac{u_3}{2k_3} e^{-2k_3 d} \right\}. \quad (30)$$

Коэффициент A_1 определяется согласно условию нормировки (9)

$$2A_1^* A_1 = \left(\frac{1 + a^* a}{2k_1} + b^* b (1 + f^* f) (1 + \tilde{b}^* \tilde{b}) d + \frac{b^* b}{2k} (f^* (\tilde{b}^2 - 1) + f ((\tilde{b}^*)^2 - 1)) \sin(2kd) + \frac{ib^* b}{2k} (f^* ((\tilde{b}^*)^2 - 1) - f ((\tilde{b}^2) - 1)) \sin^2(kd) + \frac{c^* c + \tilde{c}^* \tilde{c}}{2k_3} e^{-2k_3 d} \right)^{-1},$$

где

$$a = \frac{-iu_1 k_1 + i\lambda u_1 k_x}{E_\lambda + \Delta_1 - V_1}, \quad b_+ = \tilde{b} b, \quad b_- = \tilde{b}^* b, \quad b = \sqrt{\frac{u_1}{u_2}} \frac{1}{1 - f}, \quad \tilde{b} = \frac{u_2 k + i\lambda u_2 k_x}{E_\lambda},$$

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{u_1}{u_3}} \frac{e^{ikd} - f e^{-ikd}}{1 - f} e^{k_3 d}, \quad c = \frac{i u_3 k_3 + i \lambda u_3 k_x}{E_\lambda + \Delta_3 - V_3} \tilde{c},$$

$$f = 1 + \frac{2u_2k(E_\lambda + \Delta_1 - V_1)}{(-u_2k + i\lambda u_2k_x)(E_\lambda + \Delta_1 - V_1) + E_\lambda(iu_1k_1 - i\lambda u_1k_x)}$$

Вычисление матричного элемента скорости по формуле (30) для приграничных состояний аналогично предыдущему с той разницей, что во всех коэффициентах a, b_\pm, \dots следует сделать замену $k \rightarrow iq$

$$v_x = 2\lambda\delta_{\lambda\lambda'}A_1^*A_1 \left\{ i(a^* - a)\frac{u_1}{2k_1} + iu_2 \left[-bb_+ \frac{1 - e^{-2qd}}{q} + 2fb(b_+ - b_-)d + f^2bb_- \frac{e^{2qd} - 1}{q} \right] + iu_3\tilde{c}(c^* - c)\frac{1 - e^{-2k_3d}}{2k_3} \right\}; \quad (31)$$

$$v_z \equiv 0. \quad (32)$$

Здесь нормировка (9) приводит к выражению:

$$2A_1^*A_1 = \left(\frac{1 + a^*a}{2k_1} + 2f(b_+^*b_- - b^2)d + (b^2 + b_+^*b_+) \frac{1 - e^{-2qd}}{2q} + f^2(b^2 + b_-^*b_-) \frac{e^{2qd} - 1}{2q} + (\tilde{c}^2 + c^*c) \frac{e^{-2k_3d}}{2k_3} \right)^{-1}$$

Из формул (29)–(31) следует, что разрешены только переходы с сохранением четности (на рис. 2 они показаны стрелочками). Оптические переходы для приграничных состояний существуют только в особом случае $p_1 = p_3 = 1$ при поглощении электромагнитных волн с линейной поляризацией вдоль границ раздела графена с узкощелевыми полупроводниками.

Сказанное выше можно экспериментально проверить следующим образом. Возьмем симметричную квантовую яму. Прикладывая напряжение U к нанополоске графена, можно добиться того, чтобы работа выхода V стала равной нулю, т.е. реализуется особый случай $p_1 = p_3 = 1$. Тогда появляются оптические переходы, вызванные поглощением электромагнитных волн с энергией E такой, что $E_{min} < E < \Delta_{eff}$, где Δ_{eff} – эффективная щель в спектре размерного квантования (наименьшая разница по энергии между электронными и дырочными ветвями).

Возможность образования экситонов. В заключение отметим, что возникновение эффективной щели в спектре размерного квантования может привести к образованию экситонов в квантовой яме при оптическом возбуждении (в графене энергетическая щель нулевая и экситоны отсутствуют).

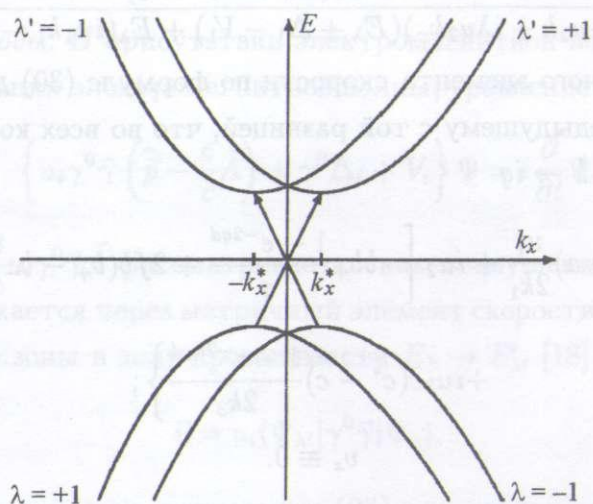


Рис. 2. Расщепление энергетического спектра в несимметричной квантовой яме. Показаны разрешенные переходы с сохранением четности.

В симметричной квантовой яме ортоэкситоны с полным спином электрона и дырки $S = 1$ являются прямыми, поэтому и короткоживущими, а параэкситоны с $S = 0$ [30] являются долгоживущими, поскольку переходы с изменением четности запрещены (вне зависимости от того, являются ли они прямыми или нет). В несимметричной квантовой яме (рис. 2) ортоэкситоны являются непрямыми, поэтому они должны также быть долгоживущими. Ранее отмечалось, что для слоистых узкощелевых полупроводниковых гетероструктур параэкситоны являются короткоживущими, потому что переходы с изменением четности разрешены [31].

Вычисление энергии связи в планарной квантовой яме на основе графена и узкощелевых полупроводников представляет собой отдельную задачу и будет приведено в другой статье.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Nature **438**, 197 (2005).
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, P. Kim, Nature **438**, 201 (2005).
- [3] L. Brey, H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [4] L. Brey, H. A. Fertig, Phys. Rev. B **75**, 125434 (2007).
- [5] Y.-W. Son, M. L. Cohen, S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. **97**, 216803 (2006).

- [6] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (Imperial College Press, London, 1998).
- [7] T. Ando, J. Phys. Soc. Japan **74**, 777 (2005).
- [8] E. McCann, V. I. Fal'ko, J. Phys.: Condens. Matter **16**, 2371 (2004).
- [9] X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, et al., Phys. Rev. Lett. **100**, 206803 (2008).
- [10] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, et al., Science **320**, 356 (2008).
- [11] Ya. M. Blanter, I. Martin, Phys. Rev. B **76**, 155433 (2007).
- [12] M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, P. Kim, Phys. Rev. Lett. **98**, 206805 (2007).
- [13] S. Okada, Phys. Rev. B **77**, 041408(R) (2008).
- [14] Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, УФН **65**, 799 (1995).
- [15] J. V. Gomes, N. M. R. Peres, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 325221 (2008).
- [16] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, et al., Rev. Mod. Phys., in press; <http://arxiv.org/0709.1163> (2007).
- [17] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика* (М., Наука, 1969).
- [18] Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, ФТП **26**, 329 (1992).
- [19] П. В. Ратников, А. П. Силин, Краткие сообщения по физике ФИАН, **35**(11), 10 (2008).
- [20] А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **40**, 1345 (1998).
- [21] Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, Письма в ЖЭТФ **42**, 145 (1985).
- [22] Е. А. Андрюшин, С. А. Верещагин, А. П. Силин, Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 6, 21 (1999).
- [23] E. A. Andryushin, A. P. Silin, S. A. Vereshchagin, Phys. Low-Dim. Struct. **3/4**, 85 (2000).
- [24] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика* (М., Наука, 1989), стр. 90.
- [25] I. E. Tamm, Phys. Z. Sowjetunion **1**, 733 (1932).
- [26] A. V. Kolesnikov, R. Lipperheide, A. P. Silin, U. Wille, Europhys. Lett. **43**, 331 (1998).
- [27] I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [28] P. G. Silvestrov, K. B. Efetov, Phys. Rev. B **77**, 155436 (2008).
- [29] А. В. Колесников, А. П. Силин, ЖЭТФ **109**, 2125 (1996).
- [30] А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **42**, 25 (2000).
- [31] П. В. Ратников, А. П. Силин, Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 7, 17 (2006).

Поступила в редакцию 26 августа 2008 г.