01

Феноменологическая модель Рашба для расчета энергетического спектра электрона на цилиндре

© *С.С. Савинский, А.В. Белослудцев*

Удмуртский государственный университет, Ижевск
E-mail: savinsky@uni.udm.ru

В окончательной редакции 5 декабря 2006 г.

Использовано уравнение Паули с добавочным слагаемым, учитывающим спин-орбитальное взаимодействие электрона, находящегося на поверхности цилиндра. Это слагаемое выбрано в приближении феноменологической модели Рашба. Рассматриваемое приближение позволяет найти точные выражения для волновых функций и спектр электрона на поверхности цилиндра в статическом магнитном поле.

PACS: 73.22.-f

Прогресс в современных нанотехнологиях актуализировал изучение проблемы квантовых состояний электрона в низкоразмерных системах, представляющих собой конечные поверхности, одномерные и точечные структуры. Современное представление о рассматриваемой проблеме можно получить из работ [1–3], в которых обсуждается построение оператора Гамильтона для электрона, движущегося в криволинейном пространстве с учетом спин-орбитального взаимодействия. Общая проблема, имеющая здесь место, связана с анализом потенциала конфанмейнта, удерживающего электрон в низкоразмерной структуре, которая может представлять собой конечную поверхность, линию либо точку.

Рассмотрим задачу о квантовых состояниях электрона, находящегося на поверхности цилиндра. Если предположить существование локализованных состояний электрона на поверхности цилиндра радиусом R, это может быть достигнуто с помощью узкой цилиндрической потенциальной ямы, сосредоточенной вдоль поверхности, то воспользуемся известным приближением „электрон на цилиндре“. Спектр электрона в рассматриваемом случае (без учета спина) в статическом магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра, определится из соотношения

$$E_{m,k} = \frac{\hbar^2}{2m_* R^2}\left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_*}, \tag{1}$$

здесь m_* — эффективная масса электрона, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ — постоянная Планка, $\Phi = \pi R^2 B$ — поток магнитного поля через сечение трубки, $\Phi_0 = \frac{ch}{|e|}$ — элементарный квант магнитного потока, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ — магнитное квантовое число, $\hbar k$ — продольный импульс электрона. Включение магнитного поля приводит к расщеплению энергетических уровней с заданными магнитными квантовыми числами, уровни с положительными квантовыми числами m поднимаются по энергии, отрицательными — опускаются.

Приближение (1) исходит из предположения о достаточно большой глубине и малой ширине цилиндрической ямы, удерживающей электрон на поверхности, в результате расстояния между уровнями энергии движения электрона в направлении нормали к поверхности велики; мы предполагаем, что электрон по соответствующим квантовым числам находится в нижнем энергетическом состоянии. Недостатком рассмотренного приближения является игнорирование спина электрона, спин может быть учтен с помощью уравнения Паули для электрона на поверхности цилиндра [4]. Однако уравнение Паули не учитывает эффектов, связанных со спин-орбитальным взаимодействием и вращением спина при движении электрона по поверхности, эти добавочные слагаемые к уравнению Паули мы феноменологически учтем с помощью модели Рашба.

В этой модели к гамильтониану „электрон на цилиндре“ добавляется оператор, линейный по матрице Паули и импульсу, представляющий собой смешанное произведение, в которое входит вектор нормали к поверхности цилиндра.

$$V = \gamma \mathbf{n} \cdot [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}], \tag{2}$$

где $\boldsymbol{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули, $\mathbf{p}$ — оператор импульса, $\mathbf{n}$ — локальная нормаль к поверхности цилиндра, γ — феноменологическая константа спин-орбитального взаимодействия. Раскрывая смешанное произведение, входящее в формулу (2) на цилиндрической поверхности в локальном базисе, нетрудно получить $\mathbf{n}[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{P}] = \sigma_z p_\varphi - \sigma_\varphi p_z$, где $p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$ — оператор импульса вдоль оси цилиндра, $p_\varphi = -i\hbar\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial \varphi}$ — оператор импульса вращательного движения электрона по поверхности цилиндра, матрица Паули $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, а матрица σ_φ может быть получена из матриц σ_x и σ_y при помощи формул преобразования вектора из декартовой системы в локальный базис цилиндрической системы координат

$$\sigma_\varphi = -\sigma_x \sin\varphi + \sigma_y \cos\varphi = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \sin\varphi + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cos\varphi$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}.$$

Соответственно оператор Гамильтона электрона в модели Рашба на поверхности цилиндра примет вид

$$H_0 = \frac{p_z^2 + p_\varphi^2}{2m_*} + \gamma(\sigma_z p_\varphi - \sigma_\varphi p_z). \tag{3}$$

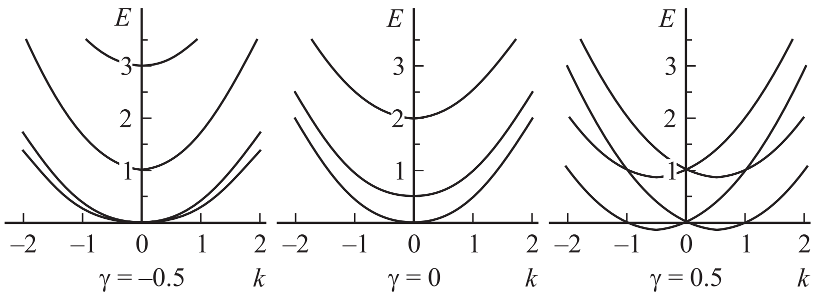
Оператор Гамильтона (3) коммутирует с оператором проекции полного момента импульса на ось Oz $J_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z + L_z$, где $L_z = Rp_\varphi$. Из формулы (3) и выражения для оператора J_z нетрудно получить формулу для коммутатора $[H_0, J_z] = \frac{\gamma p_z}{2}\left(\hbar[\sigma_\varphi, \sigma_z] + 2[\sigma_\varphi, L_z]\right)$ и убедиться в равенстве нулю последнего, так как

$$[\sigma_\varphi, \sigma_z] = 2\begin{pmatrix} 0 & ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \qquad [\sigma_\varphi, L_z] = \hbar\begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ -ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}.$$

В силу коммутации Гамильтона (3) с проекцией оператора полного момента импульса и оператора проекции импульса p_z, собственную функцию (3) будем искать в виде произведения плоской волны, являющейся собственной функцией оператора импульса, и спинора, который есть собственная функция оператора полного момента импульса

$$\psi(z, \varphi) = Ce^{ikz}\begin{pmatrix} e^{i(j-1/2)\varphi} f_1 \\ e^{i(j+1/2)\varphi} f_2 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

где C, f_1, f_2 — постоянные, определяемые из условия нормировок. Волновая функция (4) периодична по углу φ на цилиндре и собственные значения оператора J_z, равные j, принимают полуцелые значения $\pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$



Эволюция энергетического спектра электрона в зависимости от значения феноменологической константы спин-орбитального взаимодействия. Графики построены в относительных единицах $m_* = 1$, $R = 1$, $\hbar = 1$ для квантовых чисел $j = \pm\frac{1}{2}$ и $\pm\frac{3}{2}$.

Заметим, что спинорная часть волновой функции (4) может быть представлена как суперпозиция двух спинорных состояний, в которых фиксировано направление спина — вдоль либо против заданного направления оси цилиндра. Это обстоятельство связано с тем, что состояние с фиксированным значением полного орбитального момента (4) может быть реализовано неоднозначно, в зависимости от направления спина вдоль оси цилиндра, магнитное квантовое число принимает в этом случае значения, отличающиеся на единицу, в результате кратность вырождения равна двум. Коэффициенты f_1, f_2 в формуле (4) определяют вероятность реализации этих состояний. Подставляя (4) в стационарное уравнение Шредингера с оператором (3), нетрудно получить спектр

$$E = \frac{\hbar}{2m_* R^2}\left(\hbar k^2 R^2 + \hbar j^2 + \frac{\hbar - 4m_*\gamma R}{4} \pm \sqrt{j^2(\hbar - 2m_*\gamma R)^2 + 4k^2 m_*^2 \gamma^2 R^4}\right). \tag{5}$$

На рисунке построен энергетический спектр электрона по формуле (5) для значений квантового числа $j = \pm 1/2, \pm 3/2$ в зависимости от параметра γ. Как следует из рисунка, изменение параметра γ приводит к движению ветвей спектра, относящихся к состояниям с различными значениями квантового числа j.

Включение магнитного поля, направленного вдоль оси трубки, приводит к замене оператора импульса $\mathbf{p}$ на $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$, где $\mathbf{A}$ — векторный потенциал, соответственно в цилиндрической системе координат выберем отличную от нуля компоненту векторного потенциала на поверхности цилиндра $A_\varphi = \frac{1}{2}BR$, в результате оператор обобщенного импульса может быть представлен как

$$\mathbf{p} - \frac{e}{c}\,\mathbf{A} = \mathbf{n}_z p_z + \mathbf{n}_\varphi\left(p_\varphi - \frac{1}{2}\,\frac{eBR}{c}\right) = -\,i\hbar\mathbf{n}_z\,\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar}{R}\,\mathbf{n}_\varphi\left(-\,i\,\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right),$$

где $\mathbf{n}_z$ и $\mathbf{n}_\varphi$ — единичные векторы локального базиса на поверхности цилиндра. Оператор Гамильтона в модели Рашба (3) с учетом магнитного поля, направленного вдоль оси трубки, принимает вид

$$H_0 = \frac{p_z^2 + \left(p_\varphi - \frac{eR}{2c}B\right)^2}{2m_*} + \frac{1}{2}\,\mu g B\sigma_z + \gamma\left(\sigma_z\left(p_\varphi - \frac{eR}{2c}\,B\right) - \sigma_\varphi p_z\right), \tag{6}$$

где $\mu = \mu_B\frac{m_0}{m_*}$, m_0 — масса свободного электрона, $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0c}$ — магнетон Бора, c — скорость света, g — эффективный фактор. Второе слагаемое в правой части уравнения (6) является следствием уранения Паули для электрона в магнитном поле, записанном в цилиндрических координатах. В предположении идеальности цилиндрической поверхности соответствующий эффективный фактор нужно положить равным 2, если цилиндрическая поверхность сформирована из вещества, то фактор g произвольный [5]. Оператор полного момента импульса электрона в магнитном поле может быть записан в следующем виде:

$$J_z = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_z + L_z = \frac{\hbar}{2}\,\sigma_z + R\left(p_\varphi - \frac{eR}{2c}\,B\right),$$

его собственные значения равны $j_* = j + \frac{\Phi}{\Phi_0}$. Волновая функция (4) при соответствующей замене j на j_* является собственной функцией оператора (6), соответственно электронный спектр определится из формулы

$$E = \frac{1}{2m_*R^2}\Bigg[\hbar^2k^2R^2 + \hbar^2 j_*^2 + \frac{\hbar^2}{4} - \hbar\gamma R m_*$$
$$\pm\sqrt{(\hbar^2 j_* - \mu g m_* R^2 B)^2 + 4\hbar^2\gamma^2 m_*^2 R^2(k^2R^2 + j_*^2) - 4\hbar\gamma m_* R j_*(\hbar^2 j_* - m_* R^2 \mu g B)}\Bigg]. \tag{7}$$

Включение магнитного поля приводит за счет второго и третьего слагаемых в (6) к расщеплению и сложной эволюции спектра.

Рассмотренная модель электрона на поверхности цилиндра может оказаться полезной для анализа электронных свойств однослойных углеродных нанотрубок малого радиуса, в которых необходимо учитывать влияние кривизны трубки на параметры спектра, связанные со спин-орбитальным взаимодействием [3]. В литературе для теоретического исследования электронных свойств нанотрубок используется феноменологическая модель [6], получаемая из приближения сильной связи.

Список литературы

[1] *Магарилл Л.И., Чаплик А.В., Этин М.В.* // УФН. 2006. Т. 175. № 9. С. 995–1000.
[2] *Романенко А.Н., Окотруб А.В., Кузнецов В.Л., Котосонов А.С., Образцов А.Н.* // УФН. 2006. Т. 175. № 9. С. 1000–1004.
[3] *Белов В.В., Доброхотов С.Ю., Маслов В.П., Тудоровский Т.Я.* // УФН. 2006. Т. 175. № 9. С. 1004–1010.
[4] *Фок В.А.* Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
[5] *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, Гл. редакция физико-математической литературы, 1972.
[6] *Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C.* Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes. N.Y.: Academic Press, 1996.