

На правах рукописи

Коротаев Павел Юрьевич

**Исследование особенностей спектра и электронного
транспорта в апериодических цепочках квантовых
точек**

Специальность: 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2013

Работа выполнена на кафедре теоретической физики и квантовых технологий
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего
профессионального образования “Национальный исследовательский технологический
университет “МИСиС”.

Научный руководитель: д.ф.-м.н., профессор,
Векилов Юрий Хоренович

Научный консультант : д.ф.-м.н., профессор,
Капуткина Наталия Ефимовна
(кафедра физической химии, НИТУ “МИСиС”)

Официальные оппоненты: д.ф.-м.н., главный научный сотрудник,
Успенский Юрий Алексеевич
(ФИАН им. П.Н. Лебедева)
к.ф.-м.н., старший преподаватель,
Бажанов Дмитрий Игоревич
(физический факультет МГУ им.
М.В. Ломоносова)

Ведущая организация: Институт спектроскопии Российской академии
наук, г. Троицк

Защита состоится 6 июня 2013 г. в 16:30 на заседании диссертационного совета
Д 12.132.08 при Национальном исследовательском технологическом университете
“МИСиС”, расположенном по адресу: 119049, Москва, Ленинский проспект, д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального исследовательского
технологического университета “МИСиС”.

Автореферат разослан «_____» _____ 2013 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета,
д.ф.-м.н., профессор

Мухин С.И.

Общая характеристика работы

Актуальность работы.

В настоящей диссертационной работе изучаются системы одномерных апериодических последовательностей квантовых точек. Параметры таких систем изменяются вдоль них по определённом закону, не периодически, но и не произвольно. И апериодические системы и квантовые точки сами по себе являются отдельными объектами исследований. Интерес к апериодическим системам возрос после открытия квазикристаллов [8]. Квазикристаллы обладают апериодическим дальним порядком, и вначале изучение апериодических систем рассматривалось как способ их описания. Поэтому были изучены атомные апериодические последовательности (например, [9–12]). В настоящее время апериодические структуры из полупроводниковых квантовых ям и металлических нанокластеров изучаются и применяются в оптике и электронике [13, 14]. Такие системы замечательны тем, что имеют нетривиальные спектральные свойства, в отличие от периодической системы, и в них существуют критические состояния, которые не являются ни протяжёнными, ни экспоненциально локализованными. Эти свойства используются, например, для организации оптических фильтров и волноводов. В настоящей работе объектами, которые располагаются в апериодическом порядке, являются квантовые точки.

Квантовые точки активно исследуются и применяются в лазерной технике, оптике, электронике [15–25]. Особенностью квантовых точек является то, что квантовая точка представляет собой искусственный атом с полностью дискретным спектром. Другой особенностью является сильная зависимость состояний носителя заряда в квантовой точке от размеров и формы структуры, и от внешних воздействий. Это позволяет создавать системы квантовых точек, свойствами которых можно управлять.

Цели диссертационной работы:

1. Исследование электронных энергетических спектров апериодических цепочек квантовых точек в приближении сильной связи в смешанной модели, то есть когда в апериодическом порядке изменяются и узельная энергия и интегра-

лы перекрытия между соседними узлами. Рассмотреть следующие системы: цепочка Тью-Морзе, двупериодическая цепочка, цепочка Рудина-Шапи́ро.

2. Изучение степени локализации электронных состояний в апериодических цепочках квантовых точек в смешанной модели и влияния на неё параметров модели.
3. Изучение влияния магнитного поля на спектр апериодических цепочек квантовых точек в смешанной модели и на степень локализации электронных состояний.

Научная новизна.

В работе рассчитаны спектры и спектральные свойства (плотность состояний, степень локализации, проводимость) апериодических цепочек Тью-Морзе, Рудина-Шапи́ро и двупериодической цепочки в приближении сильной связи в смешанной модели и показано, как эти свойства меняются при варьировании параметров модели: энергии электрона на узле, интегралов перекрытия, длины системы. До настоящего времени в основном рассматривались упрощённые узельная и смешанная модели апериодических последовательностей, в которых пренебрегается соответственно изменением интегралов перекрытия и узельной энергии.

Ранее проводился численный анализ проводимости цепочки квантовых точек Тью-Морзе, двупериодической цепочки и цепочки Рудина-Шапи́ро [26]. В теоретической работе [27] рассматривалась цепочка Фибоначчи квантовых точек и изучалась спектральная плотность состояний. При этом не проводился анализ в смешанной модели и не проводился учёт магнитного поля. В настоящей диссертационной работе исследовано влияние магнитного поля на спектр и степень локализации в апериодических цепочках квантовых точек Тью-Морзе, двупериодической и Рудина-Шапи́ро в смешанной модели с учётом влияния магнитного поля на крутизну удерживающего потенциала электрона в квантовой точке для жёстких и циклических граничных условий.

Практическая значимость.

В работе исследовано, как при изменении параметров системы (энергии электрона в квантовой точке и интегралов перекрытия) изменяется электронный спектр и

степень локализации электронов в аperiодических цепочках квантовых точек. Показано, что данные параметры можно изменять при помощи внешнего магнитного поля, сохраняя геометрические параметры системы неизменными. Поэтому исследуемые в работе системы и полученные для них результаты могут быть применены для создания фильтров и волноводов с управляемыми свойствами.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Исследованы численно в приближении сильной связи электронные спектры одномерных аperiодических цепочек квантовых точек. Рассмотрены цепочки типа Тью-Морзе, Рудина-Шапино и двупериодическая в смешанной модели, то есть с учетом изменения по аperiодическому закону и узельной энергии и интегралов перекрытия. Показано, что спектр имеет структуру, содержащую множество щелей и подзон, и проанализировано, как изменение параметров модели (энергии электрона в квантовой точке и интеграла перекрытия между соседними точками) влияет на спектр. Показано, что при варьировании этих параметров возможно открытие щелей или перекрытие подзон.
2. Рассчитаны спектральные свойства одномерных аperiодических цепочек квантовых точек в смешанной модели: степень локализации, плотность состояний, проводимость. Показано, что степень локализации, определяемая обратной степенью участия состояний на узлах, распределена неоднородно как по ширине полной зоны, так и по подзонам спектра. Проанализирована зависимость степени локализации в системе при изменении параметров системы (интегралов перекрытия и узельной энергии). Обнаружено, что при определённых параметрах возможно наступление резонанса в системе, который сопровождается уменьшением степени локализации состояний. Этому резонансу соответствуют такие изменения в спектре системы как перекрытие подзон.
3. Исследовано влияние магнитного поля на спектр одномерных аperiодических цепочек квантовых точек в смешанной модели для циклических и жестких граничных условий. Учтено влияние магнитного поля на удерживающий потенциал для электрона в квантовой точке. Показано, как магнитное поле меняет

положение подзон и степень локализации электронных состояний.

4. В случае циклических граничных условий в магнитном поле изучены осцилляции электронной энергии и степени локализации в системе, как функции величины магнитного поля. Проанализирована зависимость периода и амплитуды этих осцилляций от параметров системы (расстояния между квантовыми точками, числа квантовых точек, энергии электрона в квантовой точке, интегралов перекрытия).

Апробация работы.

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

1. 14 Национальная конференция по росту кристаллов, Декабрь 2010, Москва.
2. 26th European Crystallographic Meeting, August 2010, Darmstadt, Germany
3. Rusnanoforum 2010, November 2010, Moscow.
4. International Conference on Quasicrystals, June 2011, Sapporo, Japan.
5. XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, August 2011, Madrid, Spain.
6. ISMANAM 2012, June 2012, Moscow.

А также на научных семинарах кафедры теоретической физики и квантовых технологий МИСиС.

Публикации.

Материалы диссертационной работы опубликованы в 2 статьях в рецензируемых журналах [1, 2] и 5 тезисах докладов в сборниках трудов международных конференций [3–7].

Личный вклад автора.

Все представленные в диссертации результаты получены лично автором или в соавторстве с руководителем. Программное обеспечение для проведения расчётов разработано лично автором. Материалы публикаций и докладов подготовлены совместно с соавторами, причём вклад автора был определяющим.

Структура и объём диссертации.

Диссертация состоит из введения, 3 глав, выводов и библиографии. Общий объём

диссертации 109 страниц, включая 51 рисунок и 3 таблицы. Библиография включает 86 наименований на 10 страницах.

Содержание работы

Во Введении изложена актуальность диссертационной работы, приведён краткий обзор современной ситуации в исследовании рассматриваемых систем и аргументирована научная новизна работы, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

Первая глава представляет собой литературный обзор и изложение методики расчётов. Приведено описание рассматриваемых апериодических последовательностей и используемой в работе модели системы квантовых точек. Изложены основные методы расчёта спектров и спектральных свойств, метода трансфер-матриц, метода точной диагонализации матрицы гамильтониана, метода анализа степени локализации, определяемой обратной степенью участия и способа оценки проводимости системы. Дан краткий обзор того, как в работе смоделирована квантовая точка. Рассмотрены методы учёта магнитного поля в рассматриваемых системах. Кратко описана ситуация с локализацией и делокализацией электронных состояний в одномерных неупорядоченных и апериодических системах, а так же изложена специфика электронных состояний в апериодических системах.

В работе рассматривалось три типа апериодических последовательностей: Тью-Морзе, Рудина-Шапиро и двупериодическая. Они являются последовательностями замещения с двухбуквенным алфавитом $\{A, B\}$, то есть каждое следующее образование последовательности можно получить из предыдущего с помощью некоторого правила замещения. Для последовательности Тью-Морзе правило замещения таково: $A \rightarrow AB$, $B \rightarrow BA$, а образования имеют вид: $A, AB, ABBA, ABBAABAAB \dots$. В двупериодической последовательности правило замещения имеет вид: $A \rightarrow AB$, $B \rightarrow AA$, и образования есть: $A, AB, ABA, ABAABAB \dots$. Наконец, образования $AA, AAAB, AAABAABA \dots$ последовательности Рудина-Шапиро могут быть получены с помо-

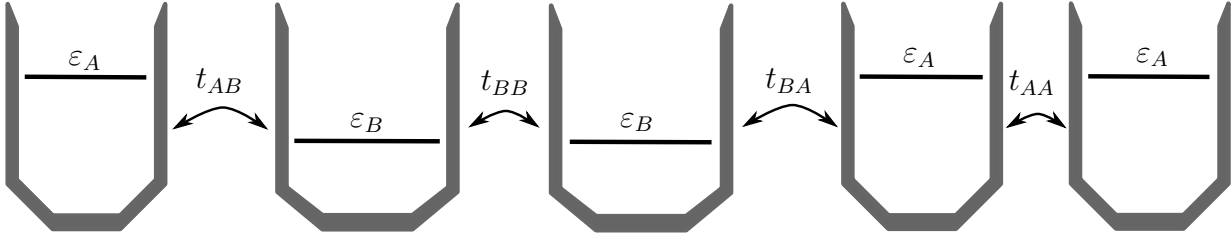


Рис. 1. Пример аперидической цепочки $ABBAA$ квантовых точек в смешанной модели. Имеется два типа квантовых точек A и B с интегралами перекрытия между ними t_{AA} , t_{AB} и t_{BB}

щью правил: $AA \rightarrow AAAB$, $AB \rightarrow AABA$, $BA \rightarrow BBAB$, $BB \rightarrow BBBA$.

Вторая глава “Спектры и транспортные свойства аперидических цепочек” состоит из шести частей. Первая часть представляет собой введение, а в следующих четырёх изложены результаты расчётов электронных спектров аперидических цепочек и их спектральных свойств: плотности состояний, проводимости и степени локализации. В шестой части рассматривается туннелирование в аперидической гранулированной системе.

В узельной модели гамильтониан задачи имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N |n\rangle \varepsilon_n \langle n| + \sum_{n=1}^N |n\rangle t_{n,n+1} \langle n+1| + |n\rangle t_{n,n-1} \langle n-1|. \quad (1)$$

Он описывает цепочку квантовых точек двух типов: A и B (рисунк 1). Её параметрами являются ε_n - энергия электрона на n -м узле, $t_{n,n\pm 1}$ - интеграл перекрытия между узлами n и $n \pm 1$ и N - число узлов в системе, а так же тип аперидической последовательности, согласно коду которого распределены эти параметры. В работе рассматривалась так называемая смешанная модель аперидической системы, когда согласно аперидическому закону меняются и узельная энергия и интегралы перекрытия. В этой главе при расчётах использовалось шесть наборов параметров, которые отличаются соотношениями между величинами интегралов перекрытия, эти параметры указаны в таблице 1, а также изучалась зависимость исследуемых величин (спектра и степени локализации) при изменении каждого из этих параметров. Нулевой уровень энергии расположен посередине между уровнями ε_A и ε_B , таким образом что $|\varepsilon_A - \varepsilon_B| = 2\varepsilon$.

	$\varepsilon, \text{ эВ}$	$t_{AA}, \text{ эВ}$	$t_{AB}, \text{ эВ}$	$t_{BB}, \text{ эВ}$	N
1	0.5	1.4	0.6	0.9	256
2	0.5	0.6	1.4	0.9	256
3	0.5	0.9	0.6	1.4	256
4	0.5	0.9	1.4	0.6	256
5	0.5	1.4	0.9	0.6	256
6	0.5	0.6	0.9	1.4	256

Таблица 1. Параметры расчётов для смешанной модели.

Вторая часть содержит результаты расчетов зависимости спектра для всех рассматриваемых цепочек от каждого типа параметров. Спектры получены диагонализацией матрицы гамильтониана. На рисунке 2 в качестве примера приведен спектр аperiодических цепочек Тью-Морзе и двупериодической в зависимости от параметров ε и t_{AA} соответственно. Электронные уровни уширяются в минизоны, которые, перекрываясь образуют сложную структуру из подзон и щелей, их положение и ширина определяются параметрами системы. Спектр не является симметричным относительно центра зоны, и при изменении параметров возможно перекрытие подзон и открытие щелей.

Также в этой части содержится анализ структуры спектра в зависимости от типа последовательности, то есть от числа элементов каждого типа и числа их пар. Зависимость структуры спектра от размера системы сводится к уменьшению расстояния между уровнями в подзонах. Аналогичные зависимости приведены для сравнения для периодической системы.

В третьей части этой главы представлены результаты расчётов плотности состояний. Локальная и интегральная плотности состояний для двупериодической цепочки приведены на рисунке 3. Плотность состояний неоднородно распределена по зоне для всех цепочек и наборов параметров, в отличие от периодической системы.

Степень локализации электронных состояний рассматривается в четвёртой части.

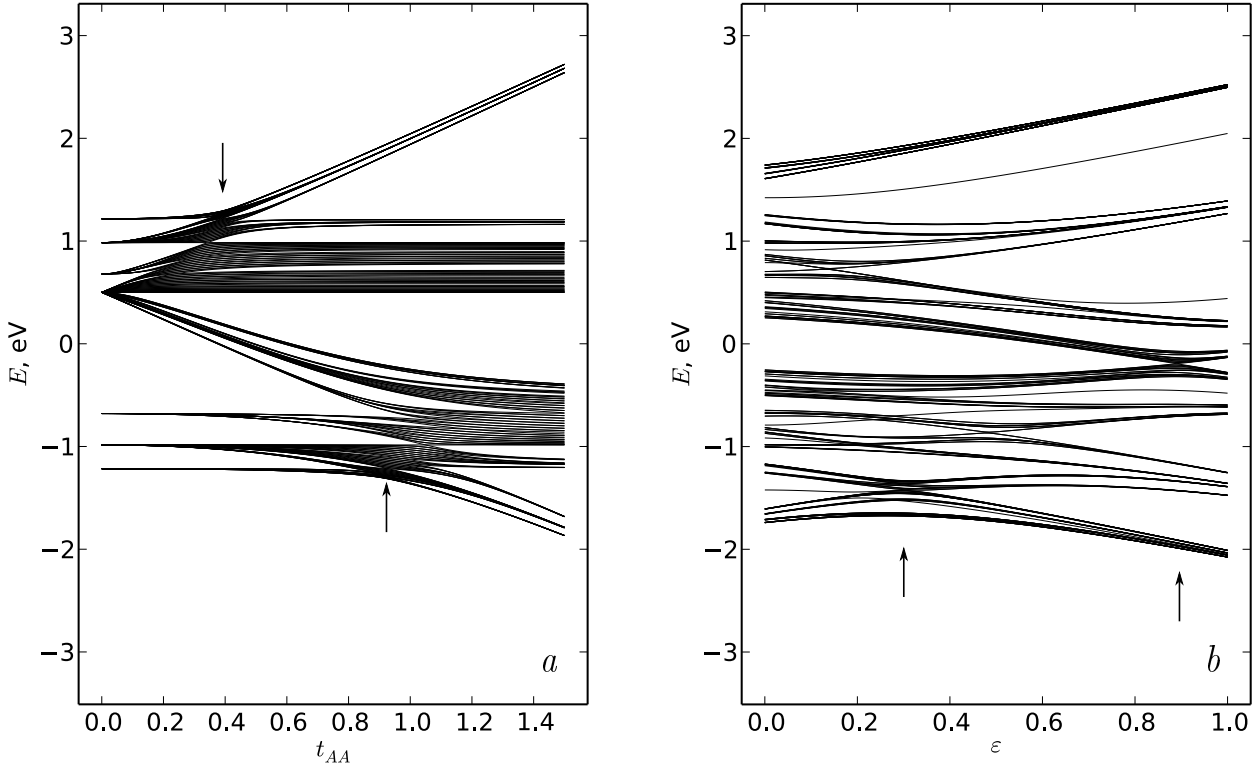


Рис. 2. Электронный спектр аперриодической цепочки в зависимости от параметра системы: (а) двух-периодическая цепочка, изменяется интеграл перекрытия типа t_{AA} ; (b): цепочка Тью-Морзе, изменяется узельная энергия ε . Остальные параметры при этом соответствуют набору 1 (таблица 1)

Степень локализации в работе получена методом анализа обратной степени участия [28]:

$$I_2 = \frac{\sum_i |\psi_i|^4}{\left(\sum_i |\psi_i|^2\right)^2}, \quad (2)$$

где ψ_i - амплитуда волновой функции на узле i . Эти узельные волновые функции на узле i представляются в виде степенной зависимости: $\psi_i \sim r^{-\alpha}$ и, используя в качестве критерия величину нормировочного интеграла, по величине степени локализации α определяется тип состояния: протяжённые ($\alpha = 0$), локализованные ($\alpha \geq 1/2$) и критические ($0 < \alpha < 1/2$). α определяется из зависимости $I_2(r)$. Критические состояния не могут быть нормированы, но и не являются протяжёнными.

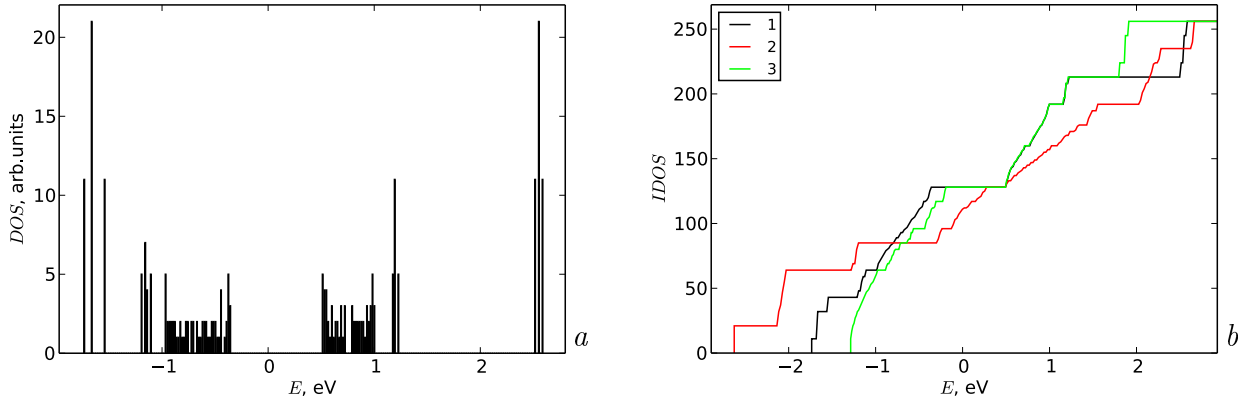


Рис. 3. (a) Локальная плотность состояний в дупериодической цепочке для набора параметров 1; (b) интегральная плотность состояний в дупериодической цепочке для трёх наборов параметров (таблица 1)

Распределение степени локализации для дупериодической цепочки и цепочки Рудина-Шапиро представлено на рисунке 4. Степень локализации неоднородно распределена по зоне и в системе существуют критические состояния. Этот результат характерен для всех рассматриваемых последовательностей.

Такие спектральные свойства как плотность состояний и степень локализации важны для определения транспортных свойств системы, поскольку последние определяются свойствами электронов вблизи уровня Ферми. Меняя положение уровня Ферми, таким образом, можно получить состояния изолятора или проводника в системе. Чтобы оценить общие тенденции в изменении степени локализации в системе при варьировании параметров, в этой части содержится анализ средней по зоне степени локализации. Во-первых, рассмотрена её зависимость от размера системы. На рисунке 5 такая зависимость приведена для цепочки Тью-Морзе.

Как видно из рисунка, средняя степень локализации в цепочке Тью-Морзе уменьшается с ростом размера системы. Такая зависимость характерна для периодической системы, в которой степень локализации стремится к нулю для бесконечно большого размера системы. Подобным образом ведёт себя зависимость $\alpha_{mean}(N)$ для дупериодической цепочки. Напротив, в цепочке Рудина-Шапиро средняя степень локализации увеличивается с размером системы, что характерно для системы с произвольным беспорядком. Таким образом, характер зависимости $\alpha_{mean}(N)$ определяется типом апери-

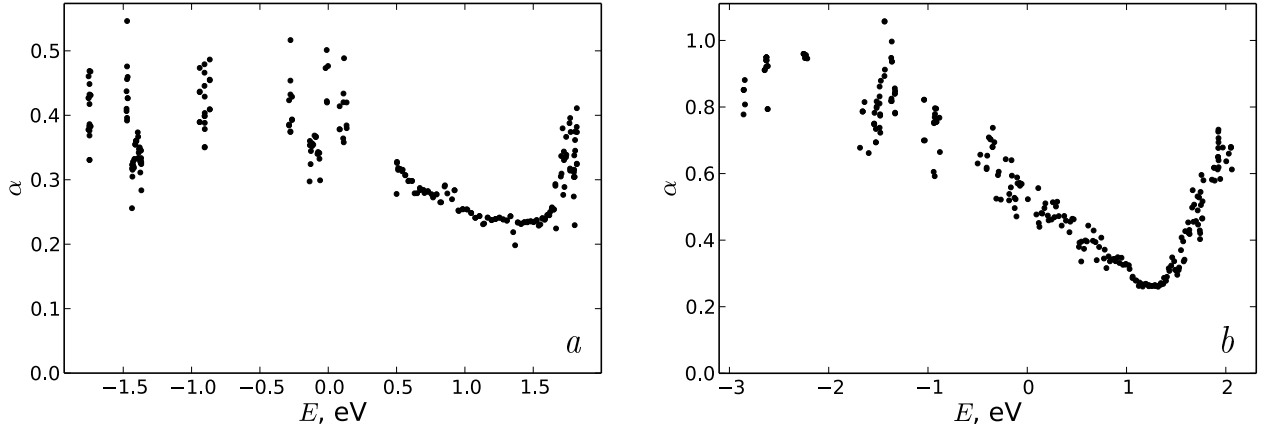


Рис. 4. Распределение степени локализации по зоне для цепочек: (a) двупериодической; (b) Рудина-Шапира для набора параметров 6 (таблица 1)

одической последовательности. В двупериодической цепочке средняя степень локализации наименьшая среди рассматриваемых последовательностей (хотя, конечно, она выше чем в периодической цепочке аналогичной длины). Наибольшая средняя степень локализации в цепочке Рудина-Шапира, а в Тью-Морзе она принимает промежуточное значение. Однако, нужно отметить, что ввиду неоднородности распределения степени локализации по ширине зоны в системе могут существовать критические слабо локализованные состояния, несмотря на то что средняя степень локализации соответствует локализованному состоянию (например, рисунок 4b).

Изменение степени локализации при таком увеличении длины цепочки также зависит от соотношения между параметрами системы. В цепочке Тью-Морзе это изменение составляет $1 \div 10\%$, а двупериодической цепочке и в цепочке Рудина-Шапира $\sim 10\%$.

Далее была исследована зависимость средней степени локализации от параметров ε и t . Она приведена, соответственно для цепочки Тью-Морзе и двупериодической на рисунке 6.

Рассмотрим зависимость $\alpha_{mean}(\varepsilon)$ (рисунок 6a). Так как ε характеризует степень беспорядка в системе, то с увеличением этой величины средняя степень локализации должна повышаться. Это выполняется для рассматриваемых систем, однако при определённых значениях параметров возможно уменьшение степени локализации при уве-

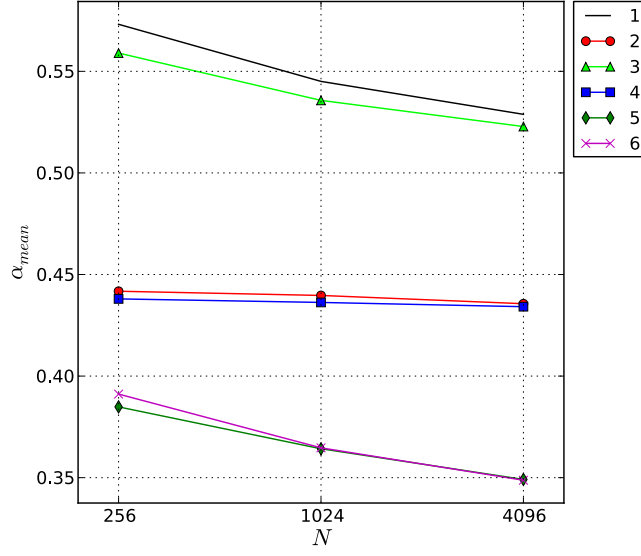


Рис. 5. Средняя степень локализации α_{mean} в цепочке Тью-Морзе в зависимости от длины системы для шести наборов параметров (таблица 1)

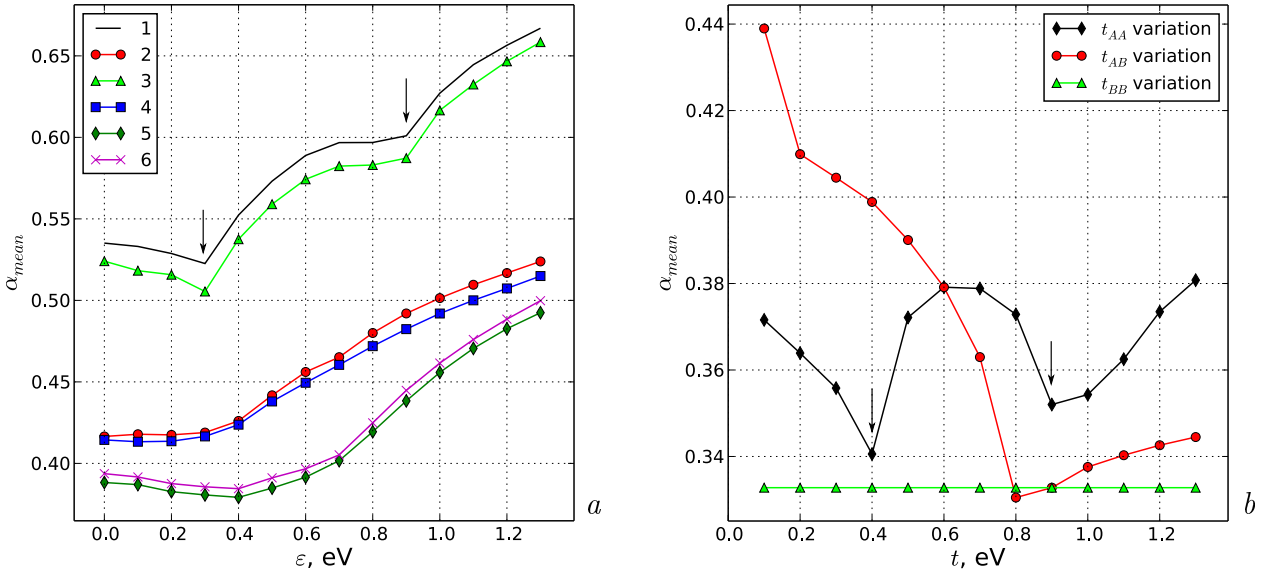


Рис. 6. Средняя степень локализации в: (a) цепочке Тью-Морзе в зависимости от величины узельной энергии ε , номер набора параметров указан в легенде; (b) двупериодической цепочке в зависимости от интеграла перекрытия каждого типа (остальные параметры соответствуют набору 1). Набору параметров 1 соответствует изменение спектра на рисунке 2. Так как в двупериодической цепочке нет пар типа BB , изменение t_{BB} не влияет свойства системы

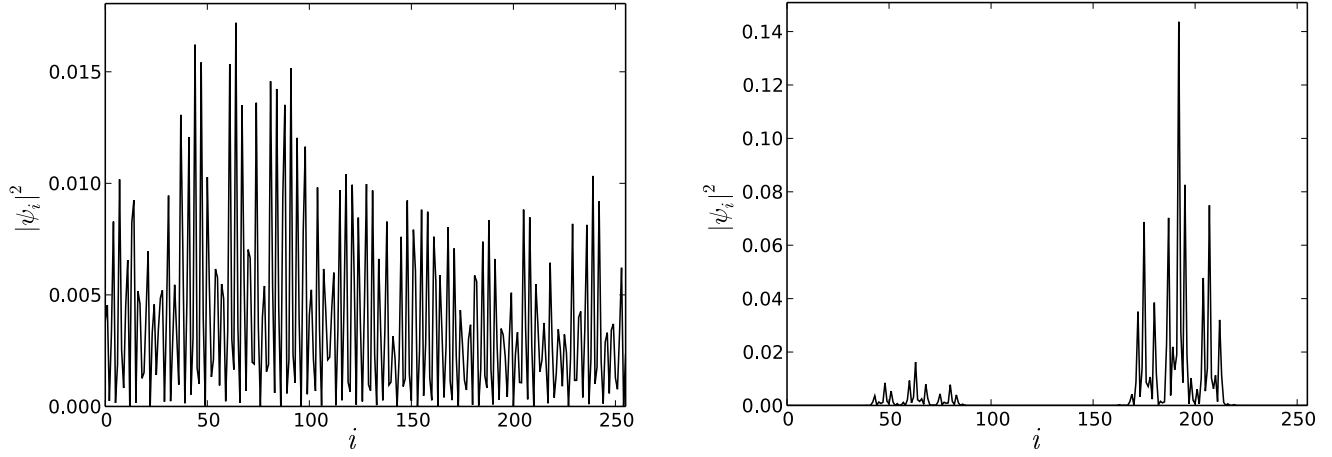


Рис. 7. Критическая (a) и локализованная (b) волновые функции в цепочке Тью-Морзе

личении ε с образованием локального минимума. Причиной этого является резонансное состояние узлов при данных параметрах. То есть волновая функция электрона становится более “размазанной” по узлам системы, что соответствует его делокализации (рисунок 7). Эта делокализация связана с изменениями в спектре. Рассмотрим это на примере набора параметров 1. Спектр системы при этом приведен на рисунке 2b. На зависимости $\alpha_{mean}(\varepsilon)$ есть минимум при $\varepsilon \approx 0.3$ эВ и излом при $\varepsilon \approx 0.8$ эВ (они показаны стрелками). В спектре при этих значениях ε происходит перекрытие подзон.

Аналогичная ситуация имеет место, если изменять величину интеграла перекрытия в системе (рисунок 6b). При увеличении перекрытия между волновыми функциями степень локализации $\alpha_{mean}(t_{AA})$ уменьшается. Но при значениях $t_{AA} \approx 0.4$ эВ и $t_{AA} \approx 0.9$ эВ есть минимумы степени локализации. Им соответствует перекрытие подзон в спектре, показанное стрелками на рисунке 2a. Объяснить это соответствие можно следующим образом. Пусть система находится в нерезонансном состоянии, и рассмотрим состояния, разделённые щелью. В каждом из этих состояний электрон локализован на какой-либо группе узлов, и переходы между этими узлами маловероятны по причине наличия щели. Теперь, меняя параметры системы, мы приближаем энергии этих состояний друг к другу. Когда они сравниваются, эти группы узлов перейдут в резонансное состояние, и это будет соответствовать уменьшению степени локализации этих состояний. В этом эффекте уменьшение степени локализации при рассматриваемом

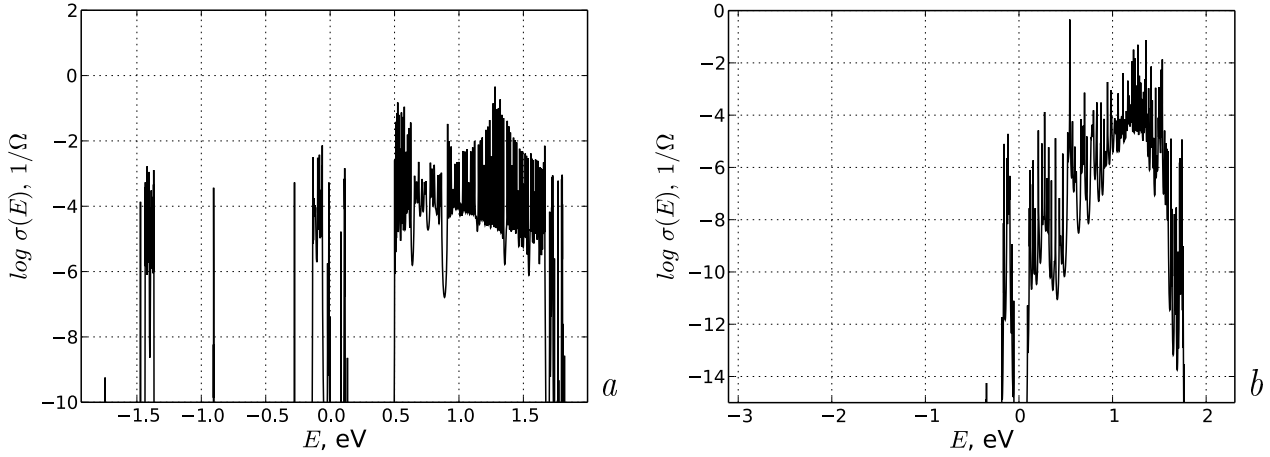


Рис. 8. Спектральная проводимость в цепочке (а) двупериодической; (b) Рудина-Шапиро. Набор параметров 6 (таблица 1)

мых параметрах составляет $\sim 10\%$.

В пятой части первой главы обсуждаются результаты расчёта спектральной проводимости в аperiодических цепочках. Для расчёта проводимости методом трансформатриц определялся коэффициент прохождения через систему, а затем, используя формулу Ландауэра, рассчитана проводимость. На примере цепочки Рудина-Шапиро и двупериодической она изображена на рисунке 8. Проводимость распределена неоднородно по ширине зоны, изменяясь на несколько порядков. Участки, где проводимость имеет наибольшую конечную величину (порядка $10^{-6} \div 10^{-1} 1/\Omega$ для различного типа цепочек и параметров), соответствуют наименее локализованным состояниям (рисунок 4). В этой области энергий возможно резонансное прохождение волны, при котором интерференция отражённых волн приводит к их ослаблению, а не к усилению, как в случае андерсоновской локализации.

В шестой части “Туннелирование в аperiодических гранулированных системах” мы в парном квазиклассическом приближении оценили вероятность туннелирования через аperiодически расположенные гранулы (квантовые точки) и оценили влияние кулоновской блокады на эту вероятность.

Результаты второй главы показывают, как изменение параметров системы позволяет менять спектр и транспортные свойства системы, оставляя при этом неизменными её геометрические параметры. Такие изменения можно осуществить, например, с

помощью внешнего магнитного поля, его влияние на аperiодическую цепочку квантовых точек рассматривается в следующей главе. Результаты второй главы опубликованы в работах [1, 2].

В третьей главе “Аperiодические цепочки квантовых точек в магнитном поле” излагаются результаты исследования влияния магнитного поля на аperiодическую цепочку квантовых точек. Она состоит из введения (первая часть) и двух частей, в которых рассматриваются соответственно жёсткие и циклические граничные условия.

Влияние магнитного поля на систему учитывалось в работе следующим образом. По аналогии с [2], квантовая точка моделировалась параболическим удерживающим потенциалом для электрона с крутизной α (не путать со степенью локализации). Поле увеличивает крутизну этого потенциала, что приводит к смещению энергетических уровней:

$$\tilde{\varepsilon}_i = \frac{\hbar}{4} \sqrt{\frac{\alpha_*}{m_*}}, \quad \alpha_* = \left(\alpha + \frac{e^2 B^2}{16 m_* c^2} \right), \quad (3)$$

где m_* - эффективная масса электрона, рассматриваются квантовые точки, содержащие только один электронный уровень.

Увеличение крутизны удерживающего потенциала также приводит к уменьшению перекрытия волновых функций на соседних узлах. В работе это учитывалось как уменьшение перекрытия волновых функций соседних осцилляторов: $t_{ij} \rightarrow t_{ij}(B)$. Наконец, калибровка векторного потенциала для узельной системы приводит к появлению добавочной фазы в интеграле перекрытия:

$$\tilde{t}_{ij}(B) = t_{ij}(B) \exp \left(-\frac{ie}{\hbar c} \int_j^i A dx \right), \quad (4)$$

где A - векторный потенциал поля, выбранный в калибровке $\mathbf{A} = -B y \mathbf{e}_x$.

Вторая часть главы содержит результаты расчётов спектров и степени локализации в аperiодической цепочке квантовых точек при жестких граничных условиях.

	ε_A , эВ	ε_B , эВ	t_{AA} , эВ	t_{AB} , эВ	t_{BB} , эВ	d_{AA} , нм	d_{AB} , нм	d_{BB} , нм	N
1	0.01	0.06	0.14	0.06	0.09	20	29	24	256
2	0.01	0.06	0.06	0.14	0.09	29	20	24	256
3	0.01	0.06	0.09	0.06	0.14	24	29	20	256
4	0.01	0.06	0.09	0.14	0.06	24	20	29	256
5	0.01	0.06	0.14	0.09	0.06	20	24	29	256
6	0.01	0.06	0.06	0.09	0.14	20	29	20	256

Таблица 2. Параметры расчётов для аperiодических цепочек квантовых точек в магнитном поле

В этом случае в системе отсутствуют перескоки с первого на последний узел и поле оказывает влияние на энергию электрона в квантовой точке и на величину интеграла перекрытия без учёта фазового множителя в (4). По аналогии со второй главой, в расчетах использовалось шесть наборов параметров (таблица 2).

Спектры двупериодической и Тью-Морзе цепочек квантовых точек в магнитном поле изображены на рисунке 9. При изменении параметров ε и t с полем подзоны спектра смещаются и общая ширина зоны уменьшается. Для рассматриваемых порядков параметров поле порядка 5 Тл смещает электронные уровни на $0.01 \div 0.1$ эВ, в зависимости от набора параметров и положения в спектре.

Степень локализации на примере цепочки Тью-Морзе представлена на рисунке 10a. Из рисунка видно, что средняя степень локализации может увеличиваться, почти не изменяться или даже уменьшаться с увеличением магнитного поля. Последние два эффекта связаны с описанным во второй главе эффектом, когда при изменении параметров ε и t потенциальные ямы в системе переходят в резонансное состояние.

Циклические граничные условия рассмотрены в третьей части главы. В этом случае в системе возможен перескок электрона с первого на последний узел (и наоборот) и система становится эффективно двумерной. При движении электрона по образовавшемуся кольцу его волновая функция приобретает дополнительную фазу, связанную с векторным потенциалом магнитного поля (эффект Ааронова-Бома). При этом возни-

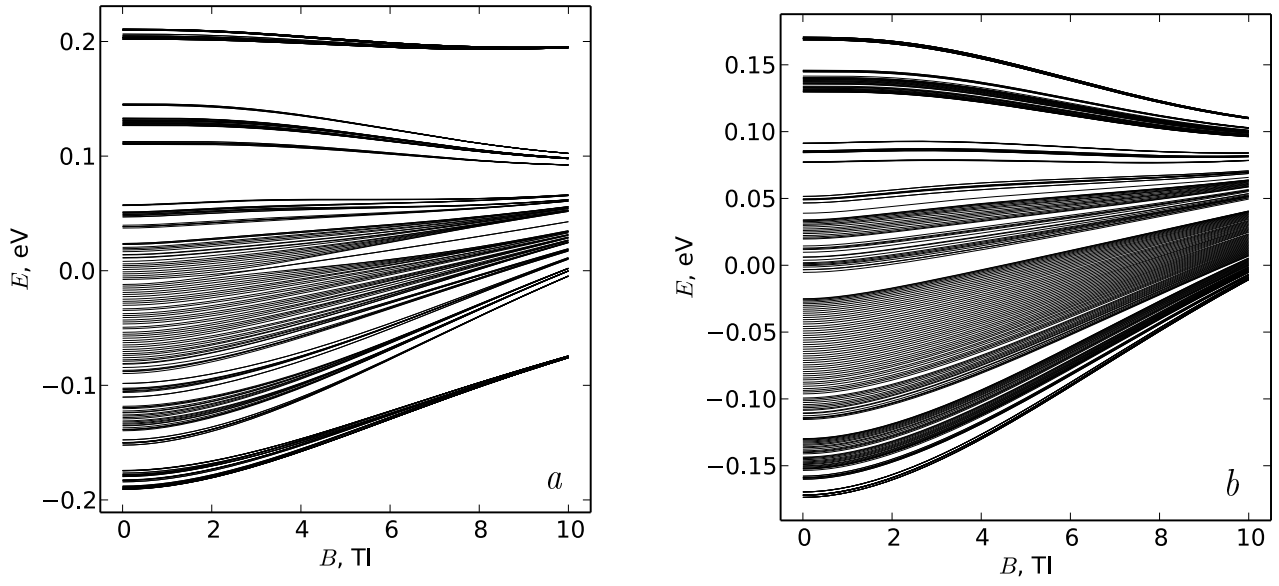


Рис. 9. Электронные спектры аperiodических цепочек квантовых точек в магнитном поле: (а) Тью-Морзе; (b) дупериодическая. Набор параметров 6 (таблица 2)

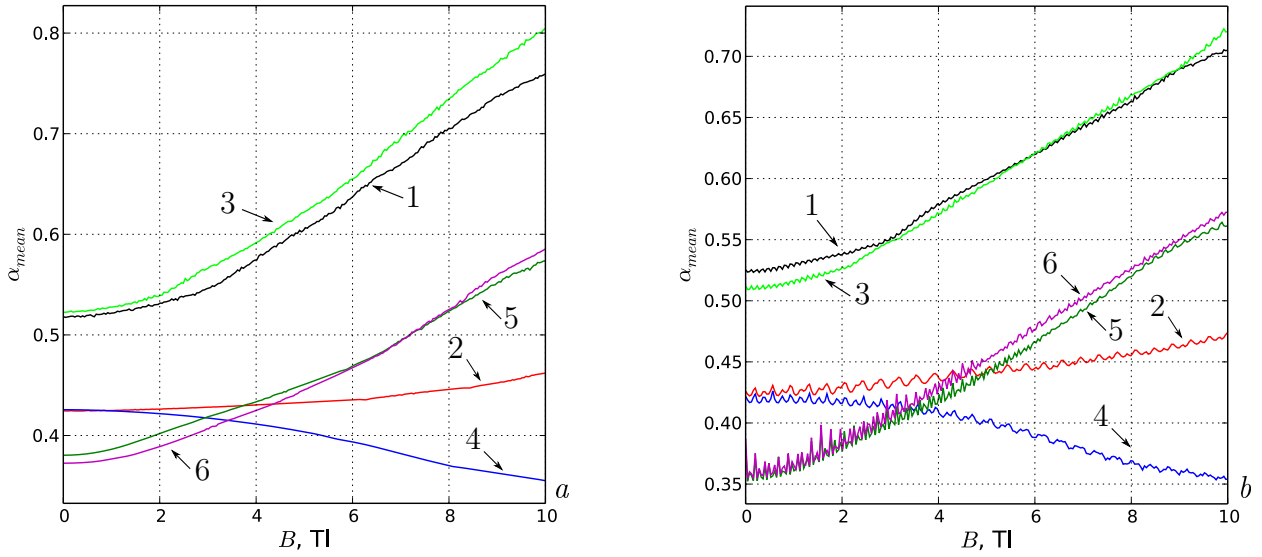


Рис. 10. Средняя степень локализации в цепочке Тью-Морзе квантовых точек в магнитном поле с (а) жёсткими граничными условиями; (b) циклическими граничными условиями для шести наборов параметров, указанных стрелками (таблица 2)

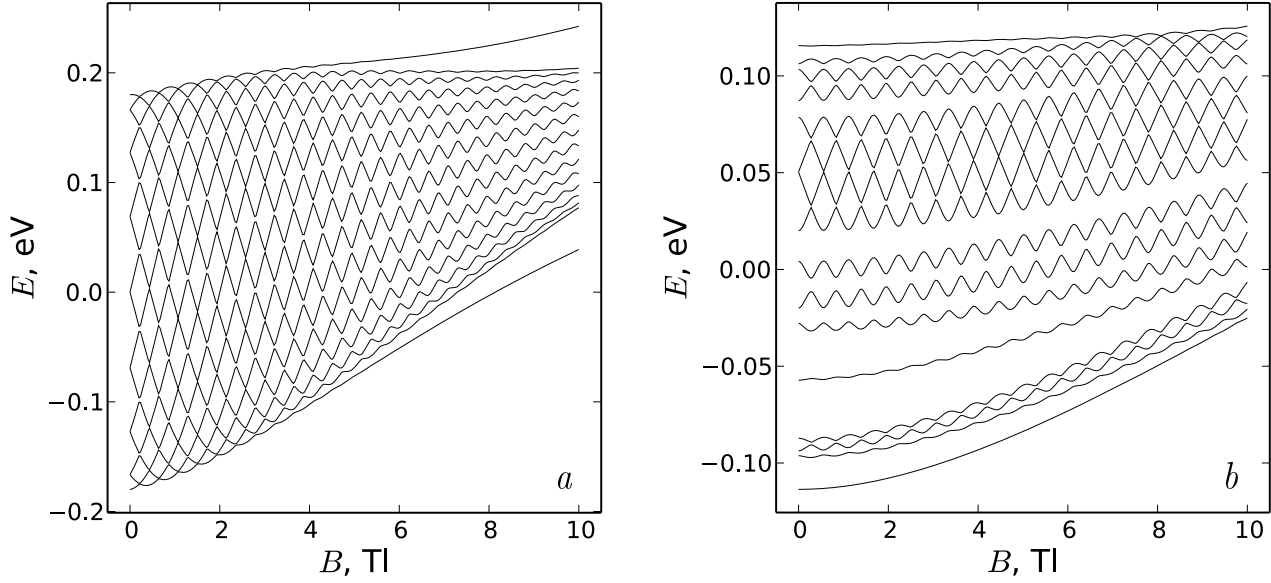


Рис. 11. Осцилляции электронной энергии в цепочках квантовых точек в магнитном поле: (a) периодическая цепочка; (b) дупериодическая цепочка

кают осцилляции электронной энергии и других физических характеристик (степени локализации, сопротивления цепочки и т.п.) как функции от величины поля. Их период определяется размерами системы, то есть числом квантов потока, пронизывающих её в данном поле. Подобные осцилляции для периодической и дупериодической цепочки приведены на рисунке 11. Учёт аперриодичности приводит к тому, что амплитуда осцилляций электронных уровней у каждого уровня “своя”, в то время как в периодической системе она монотонно увеличивалась от краёв зоны к её центру. Это связано с несимметричностью спектра, поскольку амплитуда осцилляций определяется соотношениями ε_i и t_{ij} . Изменение амплитуды этих осцилляций вызвано изменением величины интегралов перекрытия и электронной энергии в квантовой точке. В периодической системе амплитуда уменьшается с увеличением поля, в то время как в аперриодической системе это может быть не так. Это связано со сложной зависимостью спектра от параметров системы.

Величина степени локализации также начинает осциллировать. Средняя степень локализации для цепочки Тью-Морзе приведена на рисунке 10b. На зависимость $\alpha_{mean}(B)$ накладываются осцилляции, период и амплитуда которых зависят от пара-

метров системы. Амплитуда осцилляций меняется в интервале $0.001 \div 0.02$ для различных типов цепочек и наборов параметров. Величина этой амплитуды тем больше, чем менее локализованы состояния в системе (рисунок 10b), поэтому наибольшую величину она имеет в двупериодической цепочке.

Выводы и основные результаты работы

1. Исследованы электронные спектры одномерных аperiодических цепочек квантовых точек типа Тью-Морзе, Рудина-Шапиро и двупериодической. Изучено изменение спектров при варьировании параметров системы: энергии электронов в квантовых точках и интегралов перекрытия и показано, что при изменении этих параметров происходит перекрытие подзон и открытие щелей в спектре.
2. Рассчитаны спектральное распределение плотности электронных состояний, степень их локализации и спектральная проводимость в рассматриваемых аperiодических цепочках. В спектре существуют области критических состояний, им соответствует конечная проводимость системы (порядка $10^{-6} \div 10^{-1} 1/\Omega$) в зависимости от типа цепочки для величин энергии электрона в квантовой точке и интегралов перекрытия порядка 0.1 эВ.
3. Исследована зависимость средней степени локализации в рассматриваемых системах от размера системы. Показано, что в цепочках Тью-Морзе и в двупериодической при увеличении длины цепочки с 256 до 4096 узлов средняя степень локализации уменьшается на $1 \div 10\%$ в зависимости от параметров систем. В цепочке Рудина-Шапиро, напротив, она увеличивается с увеличением длины цепочки на $7 \div 10\%$.
4. Исследована зависимость средней степени локализации в рассматриваемых системах от энергии электронов в квантовой точке и интегралов перекрытия для их величин порядка 0.1 эВ. Показано, что при варьировании этих параметров возможно наступление резонанса в системе, который сопровождается уменьшением степени локализации состояний на $\sim 10\%$. Этому резонансу соответствует перекрытие подзон в спектре.

5. Изучено влияние магнитного поля на спектр и степень локализации электронов в апериодических цепочек квантовых точек для циклических и жестких граничных условий. В зависимости от соотношения между параметрами, средняя степень локализации может увеличиваться, почти не изменяться и уменьшаться с увеличением величины поля, и это связано с эффектом наступления резонансного состояния потенциальных ям в системе при изменении её параметров. Изменение степени локализации в поле порядка 5 Тл, для величин энергии электрона в квантовой точке и интегралов перекрытия порядка 0.1 эВ, составляет $5 \div 20\%$ в зависимости от типа цепочки и параметров.
6. В случае циклических граничных условий в магнитном поле изучены осцилляции электронной энергии как функции величины магнитного поля и зависимость периода и амплитуды этих осцилляций от параметров системы. Амплитуда осцилляций электронных энергетических уровней немонотонно изменяется по ширине зоны, в отличие от периодической цепочки, и изменяется с увеличением величины поля.
7. Изучена зависимость периода и амплитуды осцилляции степени локализации в магнитном поле. Амплитуда осцилляций показателя степени локализации тем выше, чем менее локализованы состояния в системе. Для величин энергии электрона в квантовой точке и интегралов перекрытия порядка 0.01 эВ в системе из 256 квантовых точек амплитуда составляет $0.001 \div 0.02$ в зависимости от типа цепочки и параметров.
8. В парном квазиклассическом приближении оценена вероятность туннелирования через апериодическую цепочку квантовых точек. Исследовано, как на эту вероятность влияет эффект кулоновской блокады.

Список публикаций по теме диссертации

1. Korotaev P., Kaputkina N., Vekilov Y. Electronic properties of aperiodic quantum dots chains // Physica E. 2012. Vol. 44. P. 1580.

2. Korotaev P., Kaputkina N., Lozovik Y., Vekilov Y. The electronic excitations and transport in aperiodic sequences of quantum dots in external electric and magnetic fields // ЖЭТФ. Т. 140 С. 794. 2011.
3. Korotaev P., Kaputkina N., Vekilov Y. Localization of current states in one-dimensional aperiodic structures // Acta. Cryst.: Proceedengs of XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography. Vol. A67. 2011. P. C626.
4. Korotaev P., Kaputkina N., Vekilov Y. Electronic transport through aperiodic sequences of quantum dots // Acta. Cryst.: Proceedengs of 26th European Crystallographic Meeting. Vol. A66. 2010. P. s212.
5. Kaputkina N., Korotaev P., Lozovik Y., Vekilov Y. The energy spectra and transport in aperiodic sequences of quantum dots in external electric and magnetic fields // Abstract book of The 11th International Conference on Quasicrystals (ICQ11), Sapporo, Japan, 2010. P. 78.
6. Kaputkina N., Korotaev P., Vekilov Y. The energy spectra and transport in one-dimensional aperiodic sequences of quantum dots in external magnetic and electric field // Тезисы докладов XIV Национальной конференции по росту кристаллов, Москва, Россия. Vol. 2. 2011. P. 115.
7. Kaputkina N., Korotaev P., Vekilov Y. Spectral properties of aperiodoc quantum dots chains // Abstract book of ISMANAM 2012, June, Moscow. 2011. P. PO214.

Цитированная литература

8. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. // Physical Review Letters. 1984. Vol. 53. P. 1951.
9. Albuquerque E., Cottam M. Theory of elementary excitations in quasiperiodic structures // Physics Reports. 2003. Vol. 376. P. 225.

10. Kohmoto M., Sutherland B., Tang C. Critical wave functions and a Cantor-set spectrum of a one-dimensional quasicrystal model // Physical Review B. 1987. Vol. 35. P. 1020.
11. Luck J. M. Cantor spectra and scaling of gap widths in deterministic aperiodic systems // Physical Review B. 1989. Vol. 39. P. 5834.
12. Vekilov Y., Isaev E., Godoniuk A. Electronic spectrum of the Three-Dimensional Penrose Lattice // JEPT. 2003. Vol. 97. P. 1005.
13. Macia E. Exploring aperiodic designs in nanophotonic devices // Rep. Prog. Phys. 2012. Vol. 75. P. 036502.
14. Macia E. The role of aperiodic order in science and technology // Rep. Prog. Phys. 2006. Vol. 75. P. 397.
15. Алфёров Ж. Двойные гетероструктуры: концепция и применения в физике, электронике и технологии // Успехи Физических Наук. 2000. Vol. 172. P. 1068.
16. Maximov M., et al. Hight-power continuous-wave operation of a InGaAs/AlGaAs quantum dot laser // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 83. P. 5561.
17. Леденцов Н., Устинов В., Иванов С. et al. Упорядоченные массивы квантовых точек в полупроводниковых матрицах // Успехи Физических Наук. 1996. Vol. 166. P. 423.
18. Днепровский В. Нелинейные оптические свойства полупроводниковых квантовых проводов и точек // Успехи Физических Наук. 1996. Vol. 166. P. 432.
19. Кулаковский В., Бутов Л. Магнитооптика квантовых проволок и квантовых точек в полупроводниковых гетероструктурах // Успехи Физических Наук. 1995. Vol. 165. P. 229.
20. Меркулов И. Спиновые системы квантовых точек // Успехи Физических Наук. 2002. Vol. 172. P. 1455.

21. Lee J., Oszwaldowski R., Cothgen C., Zutic I. Mapping between quantum dot and quantum well lasers: From conventional to spin lasers // Physical Review B. 2012. Vol. 85. P. 045314.
22. Gold P., Gschrey M., Schneider C. S. F. A., Hofling et al. Single quantum dot photocurrent spectroscopy in the cavity quantum electrodynamics regime // Physical Review B. 2012. Vol. 86. P. 161301.
23. Frey T., Leek P., Beck M. et al. Dipole Coupling of a Double Quantum Dot to a Microwave Resonator // Physical Review Letters. 2012. Vol. 108. P. 046807.
24. Bera E., Qian L., Tseng T., Holloway P. Quantum Dots and Their Multimodal Applications: A Review // Materials. 2010. Vol. 3. P. 2260.
25. Miroshnichenko A., Flach S., Kivshar Y. Fano resonances in nanoscale structures // Reviews of modern physics. 2010. Vol. 82. P. 2257.
26. Hornquist M., Ouchterlony T. Quantum dots in aperiodic order // Physica E. 1998. Vol. 3. P. 213.
27. Bakhtiari M., Vignolo P., Tosi M. Coherent transport in linear arrays of quantum dots: The effects of period doubling and of quasi-periodicity // Physica E. 2005. Vol. 28. P. 385.
28. Tsunetsugu H., Fujiwara T., Ueda K., Tokihiro T. Electronic properties of the Penrose lattice. I. Energy spectrum and wave functions // Physical Review B. 1991. Vol. 43. P. 8879.