

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ

Амирханян Сергей Меружанович

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ И
СПИНОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КВАНТОВЫХ НАНОСЛОЁВ**

Специальность: 01.04.10 – Физика полупроводников

**Диссертация на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук**

**Научный руководитель:
д. ф.-м. н., проф.
Саркисян А.А.**

ЕРЕВАН 2017

СОДЕРЖАНИЕ

| | |
|--|----|
| ВВЕДЕНИЕ..... | 4 |
| НАУЧНАЯ НОВИЗНА..... | 7 |
| ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ..... | 7 |
| ГЛАВА I: ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ МУЛЬТИПОЛИ ЭЛЕКТРОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ И СФЕРИЧЕСКОМ НАНОСЛОЯХ..... | 8 |
| §1.1 Введение..... | 8 |
| §1.2 Электростатические мультиполи электрона, в сферическом нанослое..... | 13 |
| §1.3 Электростатические мультиполи электрона в цилиндрическом нанослое при наличии внешнего магнитного поля..... | 26 |
| ГЛАВА II: ДИАМАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ПРИМЕСИ В СФЕРИЧЕСКИХ НАНОСЛОЯХ И КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ..... | 34 |
| §2.1 Введение..... | 34 |
| §2.2 Диамагнитная восприимчивость примеси в сферической системе core/shell/shell с ограничивающим потенциалом Кратцера..... | 38 |
| §2.3 Диамагнитная восприимчивость примеси в КТ с параболическим потенциалом ограничения..... | 51 |
| ГЛАВА III: НЕЗАТУХАЮЩИЙ ОРБИТАЛЬНЫЙ ТОК И ТОК СПИНОВОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА ЭЛЕКТРОНА В РАЗЛИЧНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ..... | 57 |
| §3.1 Введение..... | 57 |
| §3.2. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в цилиндрическом нанослое при наличии внешнего магнитного поля..... | 59 |
| §3.3. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в цилиндрической КТ..... | 71 |
| §3.4. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в сферической КТ..... | 75 |
| §3.5. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ примесного электрона в сферической КТ..... | 82 |

| | |
|--|-----|
| ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ | 93 |
| ЛИТЕРАТУРА | 95 |
| СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ..... | 108 |
| БЛАГОДАРНОСТИ..... | 109 |

ВВЕДЕНИЕ

Изучение различных физических процессов в полупроводниковых системах пониженной размерности – квантовых ямах (КЯ), квантовых проволоках (КП) и квантовых точках (КТ) – продолжает оставаться в центре внимания учёных и технологов, так как полученные результаты находят своё применение при конструировании полупроводниковых приборов нового поколения [1–4]. Среди квантовых наноструктур особое место занимают КТ, так как по многим своим физическим свойствам эти системы аналогичны реальным атомам [1–3]. Начиная с середины 80-х гг. прошлого столетия гигантские “искусственные атомы” стали предметом интенсивнейших исследований, так как уже тогда было ясно, что эти структуры являются очень перспективными кандидатами на роль активной функции среды для наноэлектронных приборов [4]. Благодаря эффекту полного размерного квантования энергетический спектр носителей заряда в КТ становится полностью квантованным и поэтому чрезвычайно чувствительным к изменениям геометрической формы, а также размеров изучаемого образца [4]. Подобная возможность гибкой манипуляции энергетического спектра носителей заряда позволяет получать физические системы с наперёд заданными характеристиками. Иначе говоря, реализуется ситуация, когда проектируются полупроводниковые наноэлектронные приборы с управляемыми параметрами под конкретные физические, химические, биологические и т. п. задачи. Ярким примером сказанного является создание гетероструктурных лазеров, работающих в недостижимых до этого частотных диапазонах [4].

Теоретическое описание физических характеристик КТ является одним из первых и важных этапов на пути создания наноэлектронных приборов. Так как современные методы выращивания КТ позволяют получать нульмерные системы различных геометрических форм и размеров, то для каждой геометрии КТ приходится решать соответствующее уравнение

Шрёдингера или Паули с учётом специфики граничных условий, а также физико-химических свойств как самой КТ, так и окружающей среды [3]. При этом на начальной стадии построения математической модели КТ возникает необходимость моделирования её ограничивающего потенциала с учётом симметрии изучаемой системы и её компонентного состава. Первый из указанных факторов определяет симметрию одночастичного гамильтониана, а второй – профиль и высоту ограничивающего потенциала. Изначально изучались сравнительно простые геометрии КТ: сферическая и цилиндрическая. Одной из пионерских работ, посвященной данной проблематике, является статья [5], в которой описываются электронные и экситонные состояния, а также оптическое поглощение в сферической КТ с непроницаемыми стенками. Эти системы и сейчас активно исследуются, свидетельством чего является большое количество недавно опубликованных работ по данной тематике (см., например, [6–13]). Цилиндрические КТ впервые рассматривались в работах [14, 15]. В работе [15] в приближении огибающих волновых функций вариационным методом произведён расчёт энергии основного состояния экситона в цилиндрической КТ. Физические свойства цилиндрических КТ рассмотрены в недавних работах [16–21].

В дальнейшем были реализованы пирамидальные, эллипсоидальные, конические, линзообразные и пр. КТ [22–29].

Сравнительно недавно удалось получить сферические и цилиндрические слоистые КТ типа ядро-оболочка (core/shell) (рис. 1) и ядро-оболочка-оболочка (core/shell/shell) [30–33]. Экспериментальная реализация слоистых наноструктур стала важным этапом в развитии наноэлектроники, так как эти системы стали перспективным элементом квантовой инженерии. Наряду с чисто прикладным интересом подобные системы имеют очень важное фундаментальное значение, так как с их помощью можно проверить целый ряд основополагающих положений квантовой механики. Ярким примером сказанного является экспериментальное подтверждение эффекта Ааронова – Бома для связанных

состояний электрона в кольцеобразной структуре, обладающей топологией “выколотого центра” [34]. Другим примером экспериментальной реализации известных квантовомеханических моделей является реализация с помощью тонких сферических и цилиндрических нанослоёв, соответственно, пространственного и плоского ротаторов [35, 36].

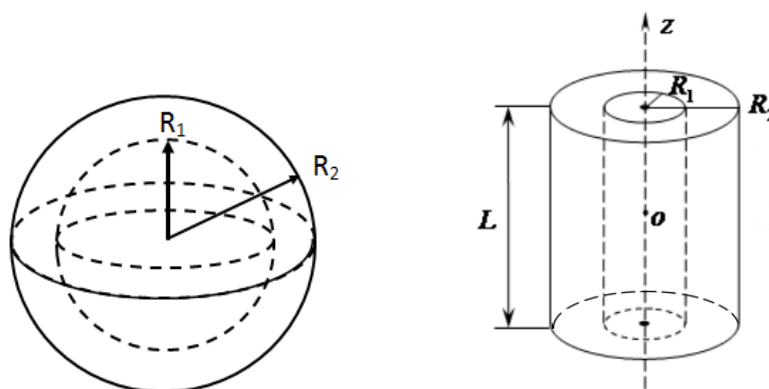


Рис. 1. Модели сферического и цилиндрического нанослоёв.

Наряду с исследованием электронных, кулоновских и оптических свойств КТ и нанослоев вызывает интерес исследование их спиновых и электродинамических характеристик. В частности, речь идёт о таких параметрах, как дипольный и квадрупольный моменты, диамагнитная восприимчивость, орбитальный ток и ток спинового магнитного момента, создаваемые электроном, локализованным в указанных системах. Исследованию этих характеристик и посвящена предлагаемая диссертационная работа.

Целью данной диссертационной работы является теоретическое исследование электростатических мультиполей, создаваемых электроном в сферическом и цилиндрическом нанослоях, диамагнетизма примесного электрона в КТ и нанослоях сферической симметрий, а также изучение особенностей тока спинового магнитного момента в цилиндрическом нанослое и в системе “примесь-сферическая КТ”.

НАУЧНАЯ НОВИЗНА

1. Для узкозонных сферического и цилиндрического нанослоёв из *InSb* с учётом непараболичности закона дисперсии носителей заряда определены дипольные и квадрупольные поправки к значениям потенциала и напряжённости электрического поля, создаваемого локализованным в них электроном.

2. Для примеси, находящейся в состояниях $1s$ и $2s$, локализованной в сферическом нанослое с ограничивающим потенциалом Кратцера, получены точные аналитические выражения для диамагнитной восприимчивости.

3. Выявлен характер поведения тока спинового магнитного момента для электрона, локализованного в цилиндрическом нанослое при наличии внешнего магнитного поля.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

- Абсолютные значения квадрупольного момента электрона, локализованного в узкозонных сферическом и цилиндрическом нанослоях, увеличиваются с ростом как внутреннего, так и внешнего радиусов.

- С уменьшением точки минимума r_0 ограничивающего потенциала Кратцера кривая зависимости диамагнитной восприимчивости $\chi_{dia}(r_0)$ носит немонотонный характер и имеет точку максимума, которой соответствует квантовый выброс электрона из нанослоя во внешнюю среду.

- Для электрона, локализованного в цилиндрическом нанослое, при наличии магнитного поля, существуют значения радиусов “вращения” $\rho_m = \sqrt{2|m|}a_M$ (m – магнитное квантовое число, a_M – магнитная длина), при которых орбитальный ток полностью гасится и остаётся только ток спинового магнитного момента. При этом данный ток в зависимости от радиальной координаты имеет немонотонный характер.

ГЛАВА I

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ МУЛЬТИПОЛИ ЭЛЕКТРОНА, ЛОКАЛИЗОВАННОГО В СФЕРИЧЕСКОМ И ЦИЛИНДРИЧЕСКОМ НАНОСЛОЯХ *InSb*

§1.1. Введение

Сферические нанослои характеризуются двумя геометрическими параметрами: внутренним и внешним радиусами. При этом зависимость поведения энергетических уровней одноэлектронного состояния при фиксированном одном радиусе и меняющемся другом носит диаметрально противоположный характер. Так, при фиксированном значении внешнего радиуса и увеличивающемся – внутреннем уровне энергии поднимаются, так как уменьшается область локализации электрона и, в соответствии с соотношением неопределённостей Гейзенберга, увеличивается импульс. Если же зафиксировать внутренний радиус и увеличивать внешний, то эффективная толщина слоя, а с ней и область локализации электрона будут увеличиваться и возникнет обратная картина поведения одноэлектронных состояний. Результаты, получающиеся для сферических и цилиндрических наноструктур, имеют общий характер, так как путём предельных переходов из этих систем могут быть реализованы как КТ сферической и цилиндрической геометрий, так и КЯ и КП (рис. 2). Ясно, что благодаря наличию дополнительных геометрических параметров у нанослоёв их физическими характеристиками можно гибче управлять.

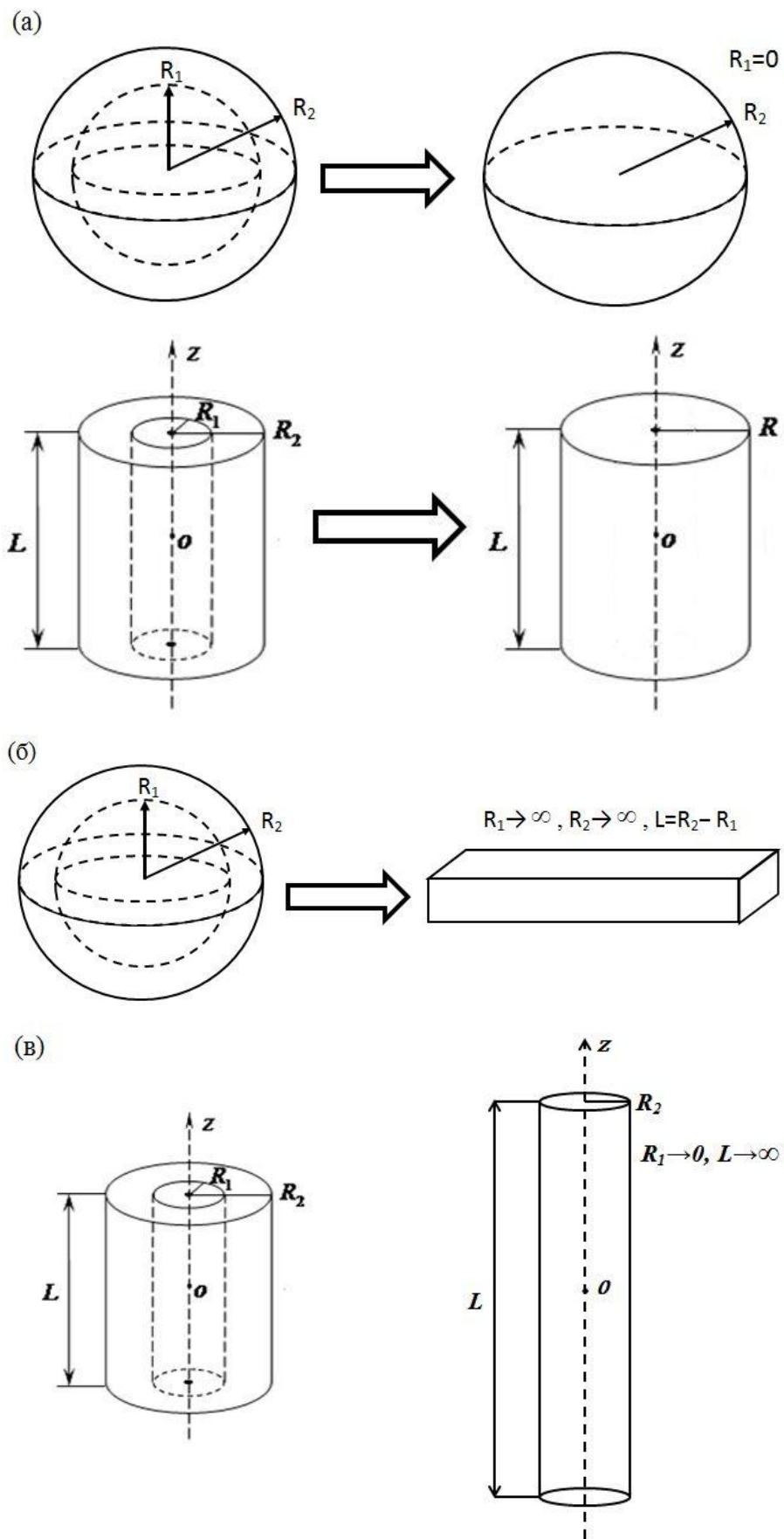


Рис. 2. Схематические переходы от сферического и цилиндрического нанослоёв к сферической КТ (а), к квантовой яме (б) и квантовой проволоке (в).

Физические свойства слоистых КТ изучались во многих работах [37–48]. В [38] выявлено изменение порядка последовательности пиков поглощения в сферических нанослоях при изменении внутреннего радиуса КТ. В [39] исследовано влияние электрон-электронного взаимодействия на магнитный момент электронов в квантовом кольце. В работе [41] рассматриваются оптические переходы в полупроводниковом сферическом нанослое под воздействием возмущающего электрического поля. В [42] исследовано межзонное оптическое поглощение и штарковский сдвиг в ансамбле сферических квантовых слоёв из *InSb*. В работе [44] проведено исследование зависимости энергетического спектра электрона, его локализации и оптического поглощения от геометрии полигональных квантовых колец, в частности, для случая треугольной геометрии.

Наряду с изменением размеров и геометрических форм КТ распространённым механизмом манипуляции энергетических уровней носителей заряда в КТ является воздействие внешних полей. Эти задачи рассмотрены в работах [49–63]. В [49] рассмотрена точно решаемая модель, описывающая поведение электронов в цилиндрической КТ $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ с параболическим потенциалом ограничения под воздействием внешних электрического и магнитного полей, направленных вдоль оси цилиндра. В [50, 51] исследовано поглощение света в цилиндрической КТ при наличии магнитного поля и в сферической КТ при наличии сонаправленных электрического и магнитного полей. В работе [52] исследовано поведение энергетических уровней и оптических переходов в параболической КТ со спин-орбитальной связью в отсутствие и при наличии внешнего магнитного поля. В [59] рассмотрены одноэлектронные состояния в квантованном цилиндрическом нанослое при наличии слабого однородного магнитного поля, когда энергия, передаваемая заряженной частице электрическим полем, становится сравнимой с энергией вращательного движения частицы. В рамках статьи [60] рассмотрено влияние поперечного однородного электрического поля на одноэлектронные состояния в квантованном

цилиндрическом слое. В работе [61] рассмотрено влияние гидростатического давления, температуры, концентрации алюминия и положения примеси на энергию связи водородоподобной донорной примеси в концентрических двойных квантовых кольцах из $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$. В [62] исследовано одновременное воздействие интенсивного лазерного и постоянного электрического полей на одноэлектронные состояния и коэффициент внутризонного поглощения в двумерном квантовом кольце из $GaAs/Ga_{0,7}Al_{0,3}As$.

Указанная выше возможность гибкой манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда в слоистых наноструктурах позволяет применять их в различных устройствах полупроводниковой наноэлектроники. Одними из наиболее интенсивно исследуемых устройств современной наноэлектроники являются одноэлектронные транзисторы, иначе называемые одноэлектронными переключателями [64–71] (рис. 3). Работа этого прибора основана на эффекте кулоновской блокады электрона путём введения в пространство между эмиттером и коллектором КТ, содержащей один или несколько электронов. Находящийся внутри КТ электрон создаёт отталкивающее кулоновское поле, которое блокирует проникновение внешнего электрона внутрь КТ (что и называют эффективной кулоновской блокадой). Последнее обстоятельство позволяет на технологическом уровне реализовывать одночастичное туннелирование через КТ, содержащую один или несколько электронов. Задача сводится к проблеме взаимодействия электрона, ограниченного в КТ, с внешним электроном. Если учесть то обстоятельство, что область локализации электрона в КТ является величиной порядка его эффективной дебройлевской длины волны, то рассмотрение такого электрона в качестве точечного заряда при определённых условиях может быть неприемлемым [72]. Поэтому возникает необходимость учёта вероятности пространственного распределения электрона, локализованного внутри узкозонного нанослоя $InSb$. Это обстоятельство, в свою очередь,

приводит к необходимости учёта вклада электростатических мультиполей в выражение для потенциала поля.

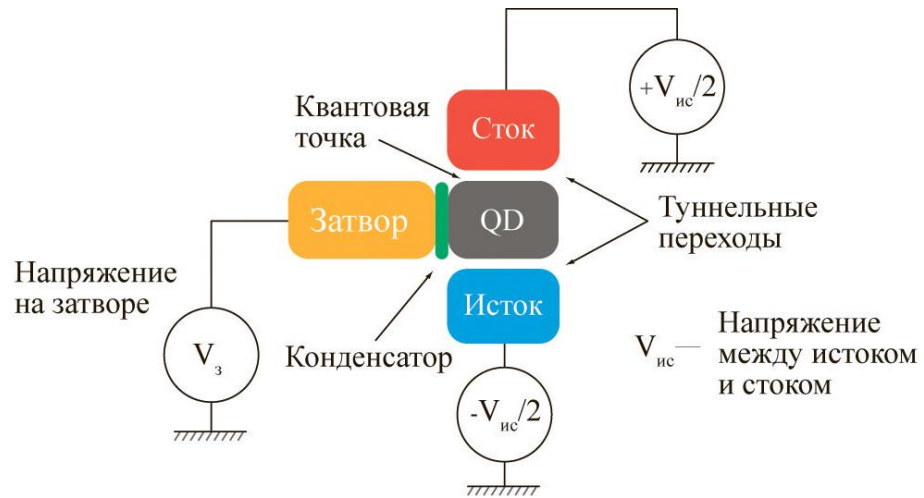


Рис. 3. Одноэлектронный транзистор.

Целью данной главы является вычисление вкладов дипольного и квадрупольного моментов в потенциал, создаваемый электроном, локализованным внутри узкозонных сферического и цилиндрического нанослоёв, а также сферической КТ из *InSb*. При этом нами учитывается, что закон дисперсии электрона является непараболическим и описывается в рамках двухзонной зеркальной модели Кейна, когда зависимость энергии от импульса по форме аналогична релятивистской [73]:

$$E = \sqrt{P^2 s^2 + \mu^2 s^4} - \mu s^2, \quad (1.1)$$

где s — параметр непараболичности ($s = 10^8$ см/с), μ — эффективная масса электрона ($\mu = 0,018\mu_0$, μ_0 — масса свободного электрона).

§1.2. Электростатические мультиполи электрона в сферическом нанослое

Рассмотрим сферический нанослой (core/shell) из *InSb* (со значением боровского радиуса электрона, равным $a_B = 530 \text{ \AA}$) с ограничивающим потенциалом:

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0, R_1 \leq r \leq R_2 \\ \infty, r < R_1, r > R_2 \end{cases}, \quad (1.2)$$

где R_1 и R_2 , соответственно, внутренний и внешний радиусы изучаемой структуры. С учётом (1.1) поведение электрона в данной структуре будет описываться стационарным уравнением Клейна – Гордона [73]. Используя (1.1), это уравнение можно записать в следующем виде:

$$\frac{\hat{P}^2}{2\mu} \Psi = \frac{\left\{ \left(E^{1h(e)} + \mu s^2 \right)^2 - \mu^2 s^4 \right\}}{2\mu s^2} \Psi. \quad (1.3)$$

Введём обозначение $\mathcal{E} = \left[\left(E^{1h(e)} + \mu s^2 \right)^2 - \mu^2 s^4 \right] / (2\mu s^2)$. Тогда выражение (1.3) [73] сводится к шрёдингеровскому виду:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi = \mathcal{E} \Psi. \quad (1.4)$$

Учитывая сферическую симметрию задачи, волновую функцию электрона можно представить как произведение:

$$\Psi_{l,m}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \psi(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (1.5)$$

где $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ – сферические гармоники, l и m – орбитальное и магнитное квантовые числа соответственно. Подстановкой (1.5) в (1.4) для радиальной волновой функции $\chi_l(r)$ получим уравнение Шрёдингера:

$$\frac{d^2}{dr^2} \chi_l(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \chi_l(r) = 0, \quad (1.6)$$

где $k = \sqrt{\frac{2\mu\varepsilon}{\hbar^2}}$. Решением данного уравнения является функция:

$$\chi_l(r) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} \left(C_1 J_{l+1/2}(kr) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kr) \right), \quad (1.7)$$

где $J_\nu(kr)$ – функция Бесселя первого рода, C_1 и C_2 – нормировочные константы.

Энергетический спектр системы определится из условия равенства нулю радиальных функций при $r = R_1$ и $r = R_2$. При этом $\chi_l(R_1) = \chi_l(R_2) = 0$.

Используя (1.7), запишем эти равенства как:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{\pi k R_1}{2}} \left(C_1 J_{l+1/2}(kR_1) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kR_1) \right) &= 0, \\ \sqrt{\frac{\pi k R_2}{2}} \left(C_1 J_{l+1/2}(kR_2) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kR_2) \right) &= 0. \end{aligned}$$

Для того чтобы C_1 и C_2 не были равны нулю, необходимо потребовать равенства нулю следующего детерминанта [74]:

$$\begin{vmatrix} J_{l+1/2}(kR_1) & J_{-(l+1/2)}(kR_1) \\ J_{l+1/2}(kR_2) & J_{-(l+1/2)}(kR_2) \end{vmatrix} = 0. \quad (1.8)$$

Коэффициенты C_1 и C_2 могут быть определены из условия $\chi_l(R_1) = 0$, а также условия нормировки $\int |\chi_l(r)|^2 dr = 1$. Из первого условия имеем:

$$C_1 J_{l+1/2}(kR_1) = -C_2 J_{-(l+1/2)}(kR_1).$$

Из второго:

$$\int_{R_1}^{R_2} \frac{\pi k}{2r} \left(C_1 J_{l+1/2}(kr) + C_2 J_{-(l+1/2)}(kr) \right)^2 r^2 dr = 1.$$

Окончательно из этих соотношений для C_1 и C_2 получаются следующие выражения [74]:

$$C_1 = -C_2 \frac{J_{-(l+1/2)}(kR_1)}{J_{l+1/2}(kR_1)},$$

$$C_2^2 = \frac{2}{\pi k} \left\{ \int_{R_1}^{R_2} \left(J_{-(l+1/2)}(kr) - \frac{J_{-(l+1/2)}(kR_1)}{J_{l+1/2}(kR_1)} J_{l+1/2}(kr) \right)^2 r dr \right\}^{-1}. \quad (1.9)$$

На рис. 4. показана зависимость квадрата модуля волновой функции электрона от радиальной координаты для состояния $l=1$, полученная с учётом вышеприведённых результатов.

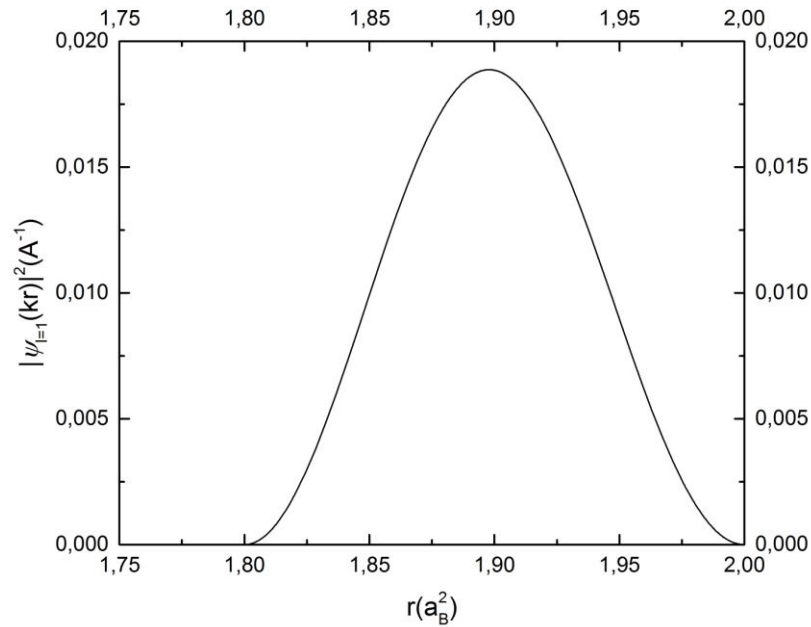


Рис. 4. Зависимость квадрата волновой функции электрона от радиальной координаты для состояния $n_r = 1$ (главное квантовое число), $l=1$ в сферическом нанослое при $R_1 = 1,8a_B$ и $R_2 = 2a_B$.

Обратимся теперь к проблеме определения электростатического поля, создаваемого электроном, локализованным в данной структуре. Задачу будем решать в предположении неизменности величины диэлектрической проницаемости во всём окружающем электрон пространстве. Согласно общей теории, для потенциала, создаваемого зарядом с плотностью $\rho(r)$, имеем [75]:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\varepsilon} \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (1.10)$$

где $\varepsilon = 18$ – диэлектрическая проницаемость окружающей нанослой среды (поляризационные эффекты на границе КТ – окружающая среда в рамках данной диссертации не учитываются). В связи с тем, что плотность электронного заряда в рассматриваемой системе будет равна $\rho(r) = |\Psi|^2 e$ (где e – заряд электрона), после стандартной процедуры разложения интеграла (1.10) по электростатическим мультиполям задача сведётся к определению средних дипольного и квадрупольного моментов электрона в системе core/shell. Рассмотрим сперва дипольный момент.

Средние значения компонент вектора дипольного момента определяются из выражения:

$$\langle P_i \rangle = \int \Psi^* P_i \Psi dV, \quad (1.11)$$

где $i = 1, 2, 3$. Здесь $P_i = ex_i$ – средние значения компонент дипольного момента, которые в сферических координатах имеют вид:

$$\begin{aligned} \langle P_x \rangle &= e \int \Psi^* \{r \sin \theta \cos \varphi\} \Psi dV, \\ \langle P_y \rangle &= e \int \Psi^* \{r \sin \theta \sin \varphi\} \Psi dV, \\ \langle P_z \rangle &= e \int \Psi^* \{r \cos \theta\} \Psi dV. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Подстановкой соответствующих выражений для сферических гармоник и интегрированием по всему объёму, приходящемуся на область слоя, можно показать, что все три величины в выражении (1.12) равны нулю. Так:

$$\begin{aligned} \langle P_x \rangle &: \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \cdot e^{-im\varphi} \cos \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0, \\ \langle P_y \rangle &: \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \cdot e^{-im\varphi} \sin \varphi d\varphi = \int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = 0, \\ \langle P_z \rangle &: \oint Y_{l,m}^* Y_{l,m} \sin \theta \cos \theta d\theta d\varphi = 2\pi \int_0^\pi [P_l^{|m|}(\cos \theta)]^2 \sin \theta \cos \theta d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 [P_l^{|m|}(t)]^2 t dt = 0. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Таким образом, для компонент среднего значения дипольного момента имеем:

$$\langle P_x \rangle = \langle P_y \rangle = \langle P_z \rangle = 0. \quad (1.14)$$

Рассмотрим теперь квадрупольный момент. Общее выражение для компонент квадрупольного момента имеет вид [72]:

$$Q_{ik} = 3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}. \quad (1.15)$$

Тензор квадрупольного момента будет иметь выражение:

$$Q_{ik} = \begin{pmatrix} 3x^2 - r^2 & 3xy & 3xz \\ 3yx & 3y^2 - r^2 & 3yz \\ 3zx & 3zy & 3z^2 - r^2 \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Как можно видеть, его след равен нулю:

$$Sp Q_{ik} = 0. \quad (1.17)$$

В сферических координатах соотношение (1.16) будет иметь вид:

$$Q_{ik} = \begin{pmatrix} r^2 (3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1) & \frac{3}{2} r^2 \sin^2 \theta \sin 2\varphi & \frac{3}{2} r^2 \sin 2\theta \cos \varphi \\ \frac{3}{2} r^2 \sin^2 \theta \sin 2\varphi & r^2 (3 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 1) & \frac{3}{2} r^2 \sin 2\theta \sin \varphi \\ \frac{3}{2} r^2 \sin 2\theta \cos \varphi & \frac{3}{2} r^2 \sin 2\theta \sin \varphi & r^2 (3 \cos^2 \theta - 1) \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Используя (1.18), необходимо найти квантовомеханические средние:

$$\langle Q_{ik} \rangle = \int_{R_1}^{R_2} \left| \chi_l(r) \right|^2 dr \int Q_{ik} |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \quad (1.19)$$

Все недиагональные компоненты тензора (1.18) зависят от $\cos \varphi$, $\sin \varphi$ и $\sin 2\varphi$, в то время как $|Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$ от угла φ не зависит. В связи с этим недиагональные компоненты тензора усреднённого значения квадрупольного момента обращаются в нуль [72]:

$$\langle Q_{xy} \rangle = \langle Q_{yz} \rangle = \langle Q_{xz} \rangle = 0. \quad (1.20)$$

Для диагональных компонент в (1.19) имеем:

$$\begin{aligned}
\langle Q_{xx} \rangle &= \int_{R_1}^{R_2} r^2 |\chi_l(r)|^2 dr \int (3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1) |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega, \\
\langle Q_{yy} \rangle &= \int_{R_1}^{R_2} r^2 |\chi_l(r)|^2 dr \int (3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1) |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega, \\
\langle Q_{zz} \rangle &= \int_{R_1}^{R_2} r^2 |\chi_l(r)|^2 dr \int (3 \cos^2 \theta - 1) |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega.
\end{aligned} \tag{1.21}$$

С учётом того, что интегрирование по углу φ в $\langle Q_{xx} \rangle$ и в $\langle Q_{yy} \rangle$ даёт

$$\frac{3}{2} \sin^2 \theta - 1 = -\frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1),$$

все три интеграла (1.21) можно связать соотношением:

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle. \tag{1.22}$$

Таким образом, средние значения компонент тензора квадрупольного момента можно представить в виде:

$$\langle Q_{ik} \rangle = \langle Q_{zz} \rangle \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.23}$$

Иначе говоря, задача определения квадрупольного момента сводится к вычислению компоненты $\langle Q_{zz} \rangle$. Таким образом, для $\langle Q_{zz} \rangle$ теперь можем написать:

$$\langle Q_{zz} \rangle = \int_{R_1}^{R_2} r^2 |\chi_l(r)|^2 dr \int Q_{zz} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega. \tag{1.24}$$

Угловой интеграл в выражении (1.24) вычислим, воспользовавшись соотношением [72]:

$$\cos \theta Y_{l,m}(\theta, \varphi) = a_{l,m} Y_{l+1,m} + a_{l-1,m} Y_{l-1,m},$$

где $a_{l,m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}$. С учётом ортогональности сферических функций имеем:

$$\oint (3\cos^2\theta - 1) |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = a_{l,m}^2 + a_{l-1,m}^2 = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}. \quad (1.25)$$

Общие выражения для функций Бесселя первого рода задаются следующим образом [76]:

$$J_{n+1/2}(x) = (-1)^n x^{n+1/2} \left(\frac{d}{xdx} \right)^n \frac{\sin x}{x} \sqrt{\frac{2}{\pi}},$$

$$J_{-(n+1/2)}(x) = x^{n+1/2} \left(\frac{d}{xdx} \right)^n \frac{\cos x}{x} \sqrt{\frac{2}{\pi}},$$

где n есть аналог l . Подставляя выражения этих функций для случая $l=1$ в выражение (1.24), для $\langle Q_{zz} \rangle$ окончательно получим:

$$\langle Q_{zz}(R_1, R_2) \rangle = \frac{4-6m^2}{5} \cdot \int_{R_1}^{R_2} \left\{ C_1 \left(\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right) - C_2 \left(\frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr) \right) \right\}^2 r^2 dr. \quad (1.26)$$

На рис. 5 и 6 приведены зависимости квадрупольного момента электрона от значений внешнего и внутреннего радиусов, соответственно, при фиксированных значениях внутреннего и внешнего радиусов, для состояния $l=1, m=0$. Как следует из приведённых рисунков, с ростом как R_1 , так и R_2 квадрупольный момент системы увеличивается. Аналогично, с ростом R_2 (при фиксированном значении R_1) максимум локализации электрона смещается от геометрического центра КТ и несферичность распределения зарядов проявляется сильнее. Это обусловлено тем, что с ростом R_1 (при фиксированном R_2) наиболее вероятная область локализации электрона отдаляется от геометрического центра системы и степень несферичности углового распределения электрона проявляется сильнее. Это и приводит к росту квадрупольного момента системы в обоих случаях. Отметим также, что для указанного состояния $l=1, m=0$ электронная

оболочка имеет форму вытянутого эллипсоида вращения. Реализуется так называемая конфигурация вытянутого эллипсоида, так как в этом случае, по аналогии с теорией атомного ядра, квадрупольный момент положителен [$\langle Q_{zz} \rangle > 0$] – коэффициент перед интегралом в выражении (1.20) равен $4/5$. Иначе говоря, для такого состояния зенитное распределение электронной волновой функции, характеризуемое орбитальным квантовым числом $l=1$, преобладает над азимутальным, характеризуемым магнитным квантовым числом $m=0$.

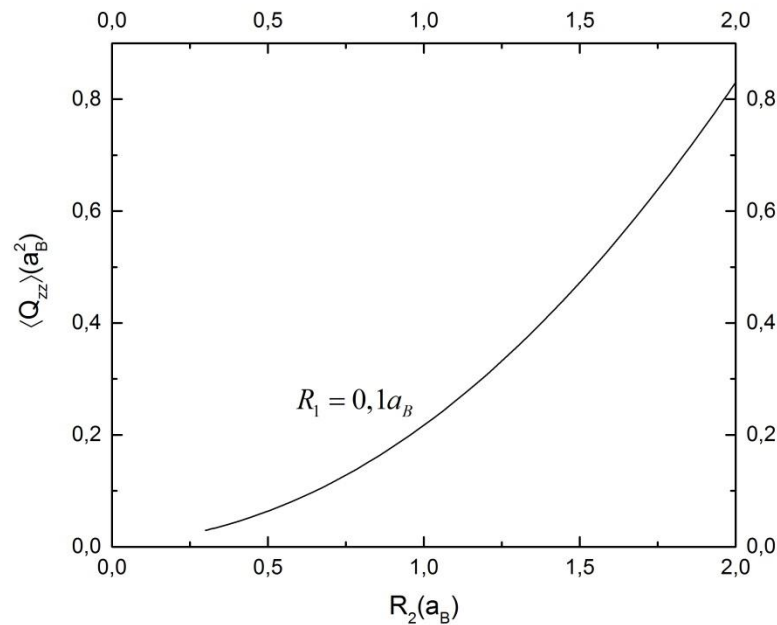


Рис. 5. Зависимость квадрупольного момента электрона от внешнего радиуса при постоянном значении внутреннего радиуса, равном $R_1 = 0,1 a_B$, для состояния $n=1$, $l=1$, $m=0$.

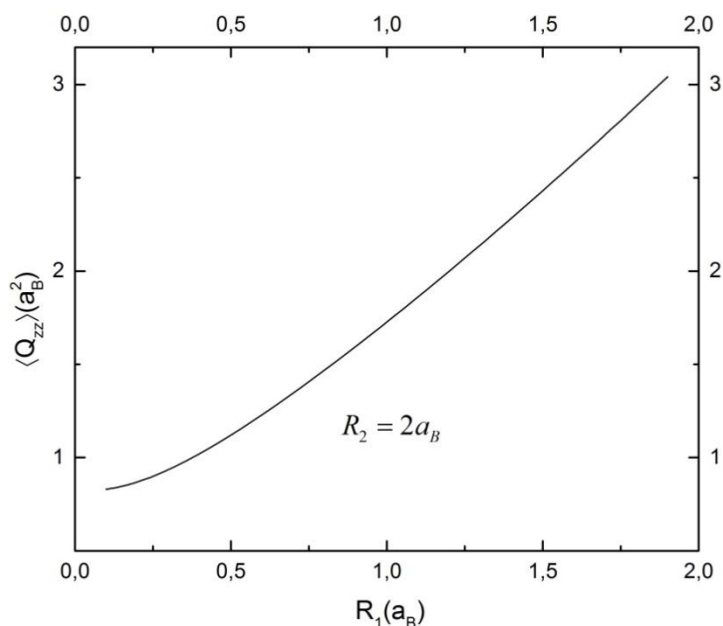


Рис. 6. Зависимость квадрупольного момента электрона от внутреннего радиуса при постоянном значении внешнего радиуса, равном $R_2 = 2a_B$, для состояния $n = 1, l = 1, m = 0$.

Обратимся к случаю, когда $l = 1, m = \pm 1$. Здесь также с ростом R_1 и R_2 квадрупольный момент становится более ярко выраженным, однако теперь уже для электронной оболочки реализуется конфигурация сплюснутого эллипсоида и квадрупольный момент системы становится отрицательным (коэффициент в (1.20) теперь уже равен $-\frac{2}{5}$). Соответствующие зависимости квадрупольного момента от внешнего и внутреннего радиусов приведены на рис. 7 и 8. Здесь так же, как и в предыдущем случае, с увеличением радиусов степень несферичности углового распределения электрона проявляется существеннее, в связи с чем происходит монотонное увеличение абсолютного значения квадрупольного момента.

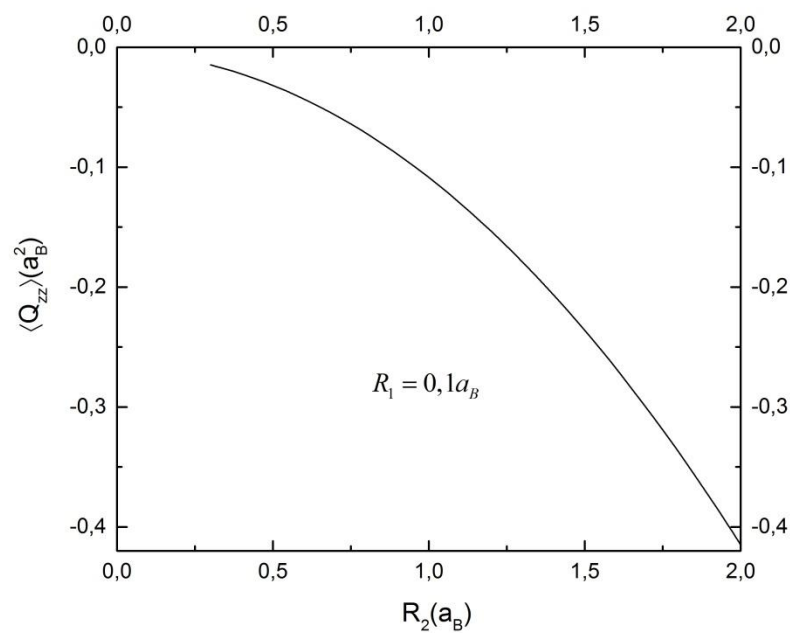


Рис. 7. Зависимость квадрупольного момента электрона от внешнего радиуса при постоянном значении внутреннего радиуса, равном $R_1 = 0,1 a_B$, для состояния $n = 1$, $l = 1$, $m = \pm 1$.

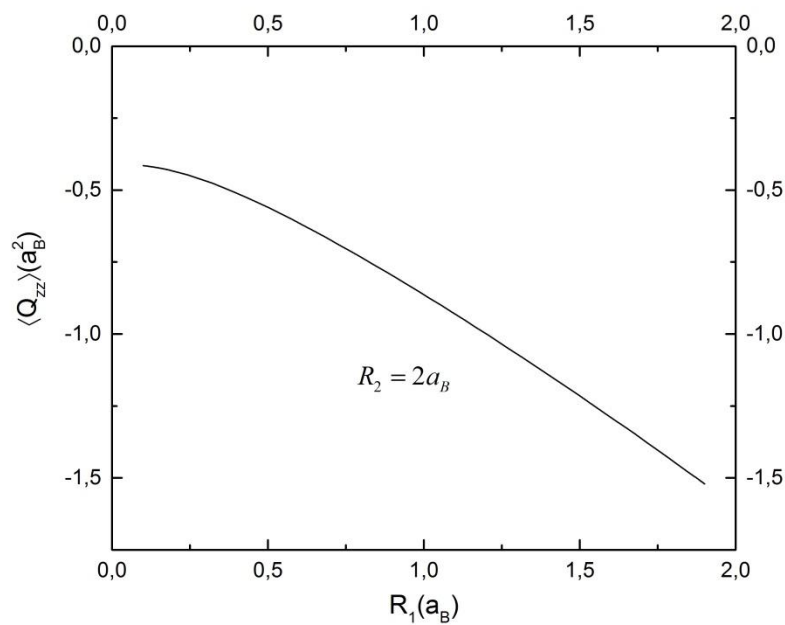


Рис. 8. Зависимость квадрупольного момента электрона от внутреннего радиуса при постоянном значении внешнего радиуса, равном $R_2 = 2 a_B$, для состояния $n = 1$, $l = 1$, $m = \pm 1$.

Для расчёта электростатического потенциала $\varphi(r)$ с учётом только первых двух членов в разложении (1.10) необходимо использовать выражение:

$$\varphi(r) = \frac{e}{\epsilon r} + \frac{e}{2\epsilon r^5} \left\{ \sum_i \sum_k \langle Q_{x_i x_k} \rangle x_i x_k \right\}. \quad (1.27)$$

Поскольку отличны от нуля только диагональные компоненты тензора $\langle Q_{x_i x_k} \rangle$, то (1.27) можно записать в виде:

$$\varphi(r) = \frac{e}{\epsilon r} + \frac{e}{2\epsilon r^5} \langle Q_{zz} \rangle \left\{ z^2 - \frac{1}{2}(x^2 + y^2) \right\}.$$

С учётом (1.26), переходя к сферическим координатам, для (1.27) окончательно получаем:

$$\varphi(r) = \frac{e}{\epsilon r} + \frac{e}{4\epsilon r^3} \frac{4-6m^2}{5} (3\cos^2 \vartheta - 1) \times \int_{R_1}^{R_2} \left\{ C_1 \left(\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right) - C_2 \left(\frac{\cos(kr)}{kr} + \sin(kr) \right) \right\}^2 r^2 dr, \quad (1.28)$$

где ϑ – угол между радиус-вектором \vec{r} и осью z . Зависимость (1.28) приведена на рис. 9.

Зная вид электростатического потенциала электрона в этой структуре, на основе выражения $\vec{E}(r) = -\nabla \varphi(r)$ при фиксированном значении ϑ можно рассчитать напряжённость электростатического поля $\vec{E}(r)$, создаваемого электроном. Соответствующая зависимость показана на рис. 10. Наконец отметим, что в зависимости от состояния электрона может быть реализована конфигурация как сплюснутого эллипсоида, так и вытянутого. Поэтому вклад от квадрупольного момента может быть как положительным, так и отрицательным, что позволяет проводить гибкую манипуляцию поля, создаваемого ограниченным в нанослое электроном.

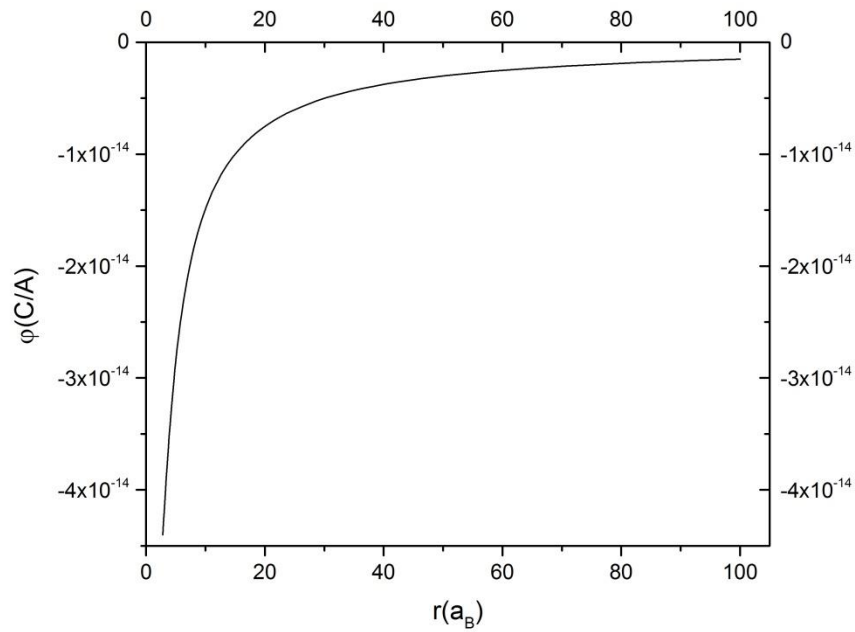


Рис. 9. Зависимость электростатического потенциала электрона для состояния $n = 1$, $l = 1$, $m = \pm 1$ при $\mathfrak{Q} = 0$ от радиальной координаты при $R_1 = 1,8a_B$ и $R_2 = 2a_B$.

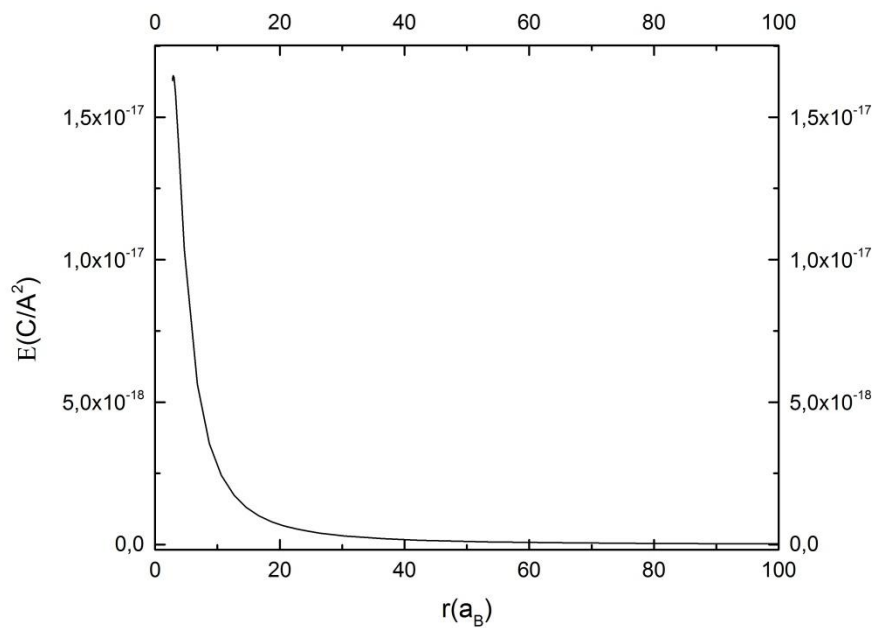


Рис. 10. Зависимость напряжённости электрического поля электрона в сферическом нанослое для состояния $n = 1$, $l = 1$, $m = \pm 1$ при $\mathfrak{Q} = 0$ от радиальной координаты при $R_1 = 1,8a_B$ и $R_2 = 2a_B$.

Приведённые выше результаты могут быть перенесены на случай узкозонной сферической КТ из **InSb** с потенциалом ограничения:

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0, r < R \\ \infty, r \geq R \end{cases} \quad (1.29)$$

Для этого достаточно совершить переход $R_1 \rightarrow 0$ и оставить только одно из решений уравнения Шрёдингера (1.3), а именно:

$$\chi_l(r) = C \sqrt{\frac{\pi kr}{2}} J_{l+1/2}(kr). \quad (1.30)$$

В этом случае зависимость $\langle Q_{zz} \rangle$ от радиуса КТ будет иметь следующий вид:

$$\langle Q_{zz}(R) \rangle = \frac{4 - 6m^2}{5} \cdot \int_0^R \left(\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right)^2 r^2 dr. \quad (1.31)$$

В свою очередь, электростатический потенциал будет определяться выражением:

$$\varphi(r) = \frac{e}{\epsilon r} + \frac{e}{2\epsilon r^3} \frac{4 - 6m^2}{5} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \cdot \int_0^R \left(\frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right)^2 r^2 dr. \quad (1.32)$$

В частности, на рис. 9 приведена зависимость квадрупольного момента электрона от радиуса сферической КТ. Отметим, что в этом случае значение квадрупольного момента начинается с нуля, когда электрон локализован в непосредственной близости от центра КТ. Далее, с увеличением радиуса КТ происходит увеличение области локализации электрона, что приводит к отдалению области наиболее вероятной локализации электрона от центра КТ. Благодаря этому степень несферичности углового распределения электрона проявляется существеннее. Поэтому происходит монотонное увеличение абсолютного значения квадрупольного момента.

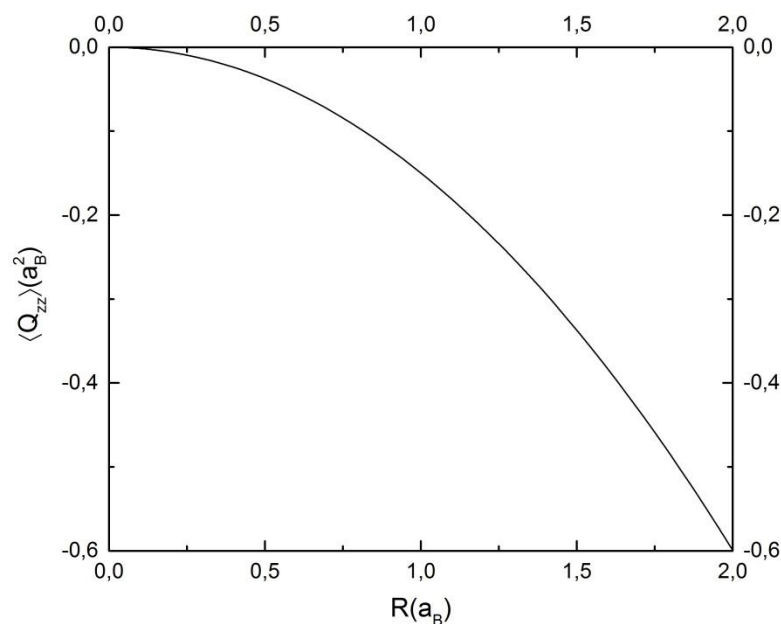


Рис. 11. Зависимость квадрупольного момента электрона для состояния $n = 1$, $l = 1$, $m = \pm 1$ от радиуса сферической КТ.

§1.3. Электростатические мультиполи электрона в цилиндрическом нанослое при наличии внешнего магнитного поля

В рамках данного параграфа рассмотрим цилиндрический нанослой (core/shell) из **InSb** с ограничивающим потенциалом:

$$U_{conf}(r) = \begin{cases} 0, R_1 < \rho < R_2, |z| < \frac{L}{2} \\ \infty, r \leq R_1, \rho \geq R_2, |z| \geq \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (1.33)$$

где R_1 и R_2 , соответственно, внутренний и внешний радиусы, а L – высота изучаемой структуры (рис. 10). Будем рассматривать задачу при наличии магнитного поля \vec{B} , направленного вдоль оси z .

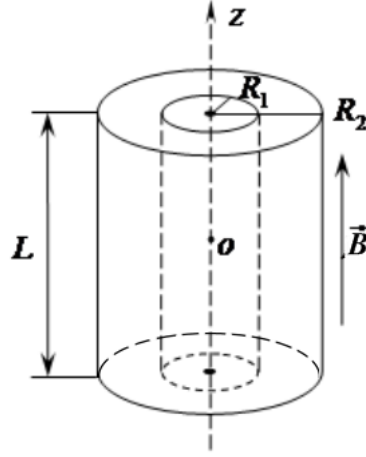


Рис. 12. Геометрические размеры и форма цилиндрического core/shell-нанослоя во внешнем магнитном поле \vec{B} .

Поведение электрона в данной структуре будет описываться стационарным уравнением типа Шрёдингера, к которому придём с учётом непараболичности закона дисперсии. Оно имеет вид:

$$-\frac{1}{2\mu} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \Psi = \mathcal{E} \Psi, \quad (1.34)$$

где $\mathcal{E} = \frac{(E_{n,m,n_r} + \mu s^2)^2 - \mu^2 s^4}{2\mu s^2}$. Для волновой функции Ψ имеем [78]:

$$\Psi_{n,m,n_r}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \begin{array}{l} \sin \frac{\pi n}{L} z (n = 2k) \\ \cos \frac{\pi n}{L} z (n = 2k + 1) \end{array} \right\} \psi(\rho), \quad (1.35)$$

где n_r – радиальное квантовое число. Калибровка векторного потенциала \vec{A} выбрана следующим образом:

$$\vec{A} = \left\{ A_\rho = A_z = 0, A_\varphi = \frac{B\rho}{2} \right\}. \quad (1.36)$$

Радиальная волновая функция $g(\rho)$ при этом выражается как [78]:

$$\psi(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\frac{\rho^2}{4a_M^2}} \left\{ C_1 F_1 \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_M^2} \right) + C_2 U \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_M^2} \right) \right\}, \quad (1.37)$$

где $\beta = \frac{E - E_n}{\hbar\omega_c} - \frac{m}{2}$, $a_M = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_c\mu}}$ (магнитная длина), ${}_1F_1$ и U , это вырожденные гипергеометрические функции первого и второго родов соответственно.

Энергетический спектр электрона, находящегося в основном состоянии, определяется из граничных условий равенства нулю волновой функции (1.37) в точках $\rho = R_1$ и $\rho = R_2$ и задаётся выражением [78]:

$$\mathcal{E}_{n,m} = \hbar\omega_c \left(\beta + \frac{m}{2} \right) + E_n, \quad (1.38)$$

где $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu L^2}$ – энергия квантования в z -направлении.

Окончательно для E_{n,m,n_r} имеем:

$$E_{n,m,n_r} = \sqrt{\mu^2 s^4 + 2\mu s^2 \left(\hbar\omega_c \left(\beta + \frac{m}{2} \right) + E_n \right)} - \mu s^2, \quad (1.39)$$

Обратимся теперь к проблеме определения электростатического поля, создаваемого электроном, локализованным в данной структуре. Задача сводится к определению средних значений дипольного и квадрупольного моментов электрона в системе core/shell. Сперва рассмотрим дипольный момент.

Средние значения компонент вектора дипольного момента определяются из выражения (1.11). С учётом того, что $P_i = ex_i$, подстановкой соответствующего выражения (1.35) для волновой функции Ψ и интегрированием по всему объёму, приходящемуся на область слоя, можно показать, что все три компоненты дипольного момента равны нулю:

$$\begin{aligned}
\langle P_x \rangle &: \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0, \\
\langle P_y \rangle &: \int_0^{2\pi} \sin \varphi d\varphi = 0, \\
\langle P_z \rangle &= \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} z \sin^2 \frac{\pi n}{L} z dz = 0.
\end{aligned} \tag{1.40}$$

Рассмотрим теперь квадрупольный момент. Общее выражение для компонент квадрупольного момента имеет вид (1.15) [72]. В цилиндрических координатах тензор квадрупольного момента выражается как:

$$Q_{ik} = \begin{pmatrix} \rho^2 (3 \cos^2 \varphi - 1) - z^2 & \frac{3}{2} \rho^2 \sin 2\varphi & 3\rho z \cos \varphi \\ \frac{3}{2} \rho^2 \sin 2\varphi & \rho^2 (3 \sin^2 \varphi - 1) - z^2 & 3\rho z \sin \varphi \\ 3\rho z \cos \varphi & 3\rho z \sin \varphi & 2z^2 - \rho^2 \end{pmatrix}. \tag{1.41}$$

Представив Q_{ik} в цилиндрических координатах и осуществляя усреднение по волновым функциям (1.35), можно убедиться, что все недиагональные компоненты $\langle Q_{ik} \rangle$ обращаются в нуль:

$$\langle Q_{xy} \rangle = \langle Q_{yz} \rangle = \langle Q_{xz} \rangle = 0. \tag{1.42}$$

Для диагональных компонент, аналогично предыдущей задаче, имеем следующую связь:

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle. \tag{1.43}$$

Таким образом, средние значения компонент тензора квадрупольного момента можно представить в виде:

$$\langle Q_{ik} \rangle = \langle Q_{zz} \rangle \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1.44}$$

Иначе говоря, задача определения квадрупольного момента сводится к вычислению компоненты $\langle Q_{zz} \rangle$. Используя (1.35), для $\langle Q_{zz} \rangle$ можем записать:

$$\langle Q_{zz} \rangle = \frac{1}{L\pi} \int_0^{2\pi} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{R_1}^{R_2} \sin^2 \left(\frac{\pi n}{L} z \right) (2z^2 - \rho^2) \psi^2(\rho) \rho d\rho dz. \quad (1.44)$$

На рис. 13 и 14 приведены зависимости квадрупольного момента электрона от значений внешнего и внутреннего радиусов для состояния $n=1$, $n_r=1$, $m=1$. Как видно из этих рисунков, с ростом R_1 и R_2 для фиксированных значений R_2 и R_1 квадрупольный момент системы увеличивается. Это обусловлено тем, что наиболее вероятная область локализации электрона отдаляется от геометрического центра системы. Последнее и приводит к росту квадрупольного момента системы в обоих случаях.

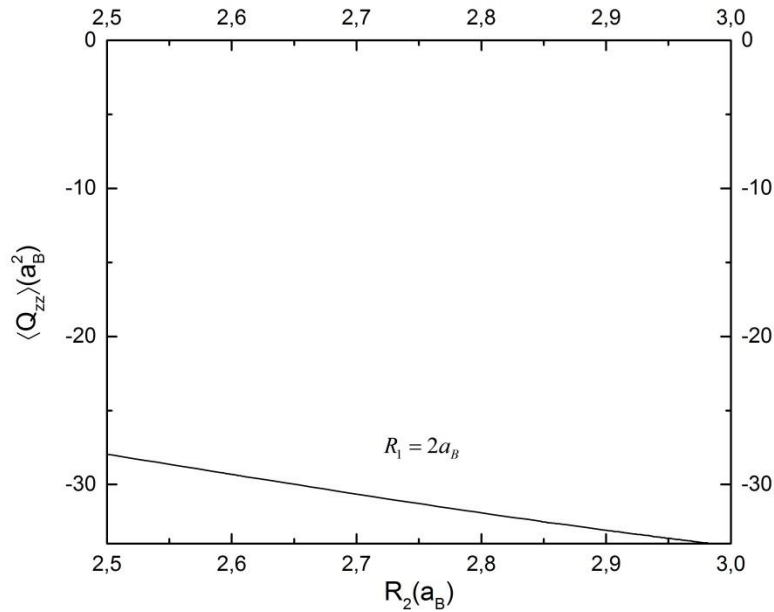


Рис. 13. Зависимость квадрупольного момента электрона от внешнего радиуса при постоянном значении внутреннего радиуса, равном $R_1 = 2a_B$, для состояния $n=1$, $m=\pm 1$, $n_\rho=1$ при $\vec{B} = 10^4 Oe$.

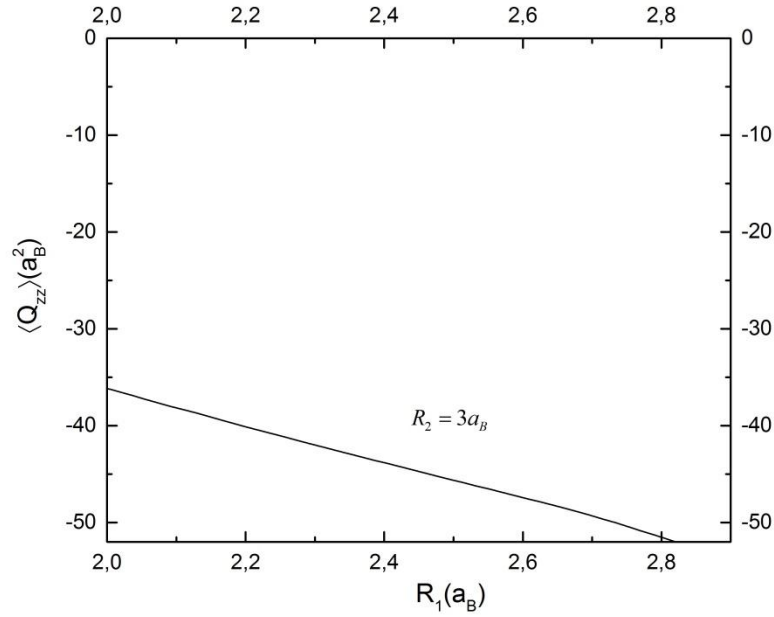


Рис. 14. Зависимость квадрупольного момента электрона от внутреннего радиуса при постоянном значении внешнего радиуса, равном $R_2 = 3a_B$, для состояния $n = 1$, $m = \pm 1$, $n_\rho = 1$ при $\vec{B} = 10^4 Oe$.

Теперь обратимся к расчёту электростатического потенциала $\varphi(r)$. В приближении первых двух членов в его разложении по мультиполям [79] получим:

$$\varphi(\rho, z) = \frac{e}{\varepsilon \sqrt{z^2 + \rho^2}} + \frac{e}{2\varepsilon (\sqrt{z^2 + \rho^2})^5} \left\{ \sum_i \sum_k \langle Q_{ik} \rangle x_i x_k \right\}. \quad (1.45)$$

С учётом (1.44) из (1.45) для потенциала найдём:

$$\varphi(\rho, z) = \frac{e}{\varepsilon \sqrt{z^2 + \rho^2}} + \frac{e \langle Q_{zz} \rangle}{2\varepsilon (\sqrt{z^2 + \rho^2})^5} \left(z^2 - \frac{1}{2} \rho^2 \right). \quad (1.46)$$

Зависимость (1.46) приведена на рис. 15.

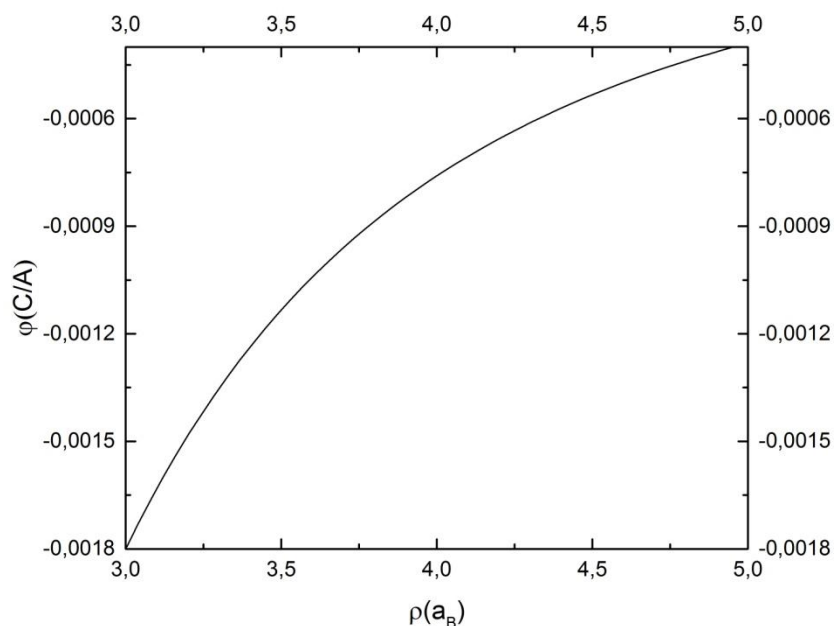


Рис. 15. Зависимость электростатического потенциала электрона для состояния $n = 1$, $m = \pm 1$, $n_\rho = 1$ от радиальной координаты при $z = 0$, $R_1 = 2a_B$, $R_2 = 3a_B$, $\mathbf{B} = 10^4 Oe$.

Зная вид электростатического потенциала электрона в этой структуре, на основе выражения $\mathbf{r} E(\sqrt{\rho^2 + z^2}) = -\mathbf{u} \nabla \varphi(\rho^2 + z^2)$ при фиксированном значении z можно рассчитать напряжённость электрического поля $\mathbf{r} E(\sqrt{\rho^2 + z^2})$, создаваемого электроном. Соответствующая зависимость показана на рис. 16. Как и ожидалось, с увеличением расстояния от цилиндрической КТ происходит убывание напряжённости электрического (рис. 15).

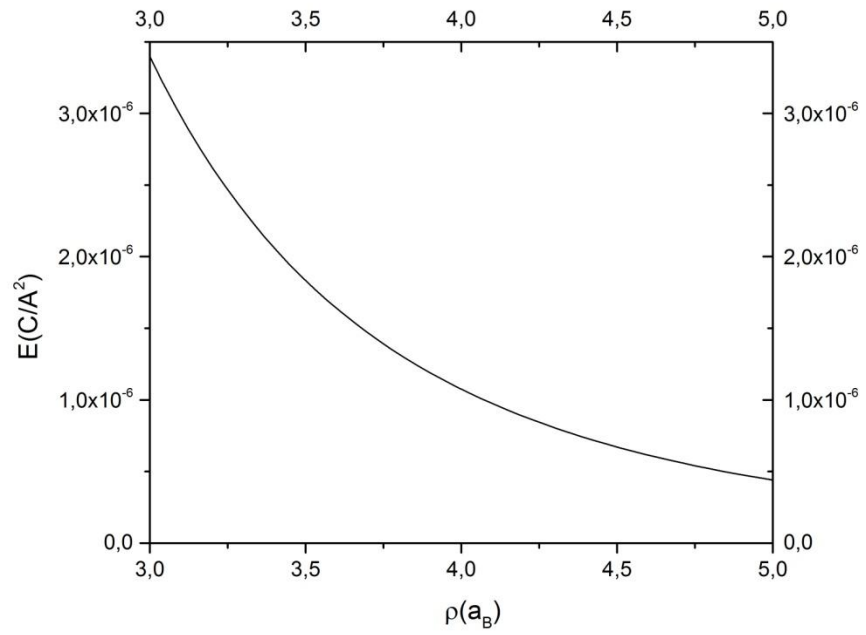


Рис. 16. Зависимость напряжённости электрического поля электрона для состояния $n = 1$, $m = \pm 1$, $n_r = 1$ от радиальной координаты при $z = 0$, $R_1 = 2a_B$, $R_2 = 3a_B$, $\vec{B} = 10^4 Oe$.

ГЛАВА II

ДИАМАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ ПРИМЕСИ В СФЕРИЧЕСКИХ НАНОСЛОЯХ И КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

§2.1. Введение

Водородоподобные системы в низкоразмерных структурах обладают целым рядом интересных свойств, обусловленных понижением размерности полупроводника. Наиболее известным размерным эффектом – в кулоновской системе пониженной размерности – является четырёхкратное увеличение энергии основного состояния примесной или же экситонной системы при переходе от трёхмерия к двумерию [3]. В свою очередь, в одномерной водородоподобной системе возникает проблема падения частицы на центр и неустойчивости основного состояния “атома водорода” [80]. Наконец, в случае локализации водородоподобной системы в КТ возникает необходимость детального исследования энергии связи, а также полной энергии. Последняя может принимать как положительные значения, так и отрицательные, а также быть равной нулю [81]. Другим важным свойством, характерным для водородоподобной системы, локализованной в КТ, является эффект квантового выброса примесного электрона из КТ или же слоя в случае конечного скачка, ограничивающего потенциала наноструктуры. Это связано с отсутствием энергетических уровней одноэлектронных состояний в трёхмерных КЯ, имеющих конечный скачок ограничивающего потенциала [82]. Указанные обстоятельства являются стимулирующими для детального изучения водородоподобных комплексов в квантовых наноструктурах различных размерностей и геометрий [83–88]. Так, в работе [83] исследованы примесные состояния в сферическом core/shell-нанослое с ограничивающим потенциалом Кратцера. Получены аналитические выражения для энергетического спектра и волновых функций примесного электрона. В [84] рассмотрены межподуровневые оптические свойства многослойной КТ при

наличии и отсутствии локализованной в центре многослойной КТ водородоподобной донорной примеси. Изучен характер воздействия примеси на оптические свойства исследуемой структуры. В работе [86] для многослойной КТ и многослойной квантовой антиточки, содержащих донорную примесь, рассчитаны линейный, нелинейный третьего порядка и полный коэффициенты поглощения. В данной главе основное внимание будет уделено описанию поведения водородоподобных систем в КТ и слоях со сферической симметрией. При этом учитываются эффект конечности скачка потенциала ограничения на границе перехода КТ – окружающая среда, а также внешнее гидростатическое давление.

Как известно, водородоподобные системы в массивных образцах в приближении скалярных эффективной массы и диэлектрической проницаемости обладают:

- сферической симметрией;
- скрытой симметрией (возникает дополнительное вырождение уровней энергии по орбитальному квантовому числу l);
- полная энергия и энергия связи совпадают, так как уровень отсчёта энергии является нулевым.

Выражения для энергетического спектра и волновой функции для подобных систем могут быть получены путём прямого переобозначения массы (вводится эффективная масса μ) и заряда (вводится эффективный заряд $e^* = e / \sqrt{\varepsilon}$, где ε – диэлектрическая проницаемость полупроводника). Иначе говоря, вместо ридберговской энергии $E_R = \frac{me^4}{2h^2}$ вводится эффективная

энергия Ридберга $E_R^* = \frac{\mu e^4}{2\varepsilon^2 h^2}$.

Следует отметить, что преимуществом кулоновских систем в нульмерных структурах является возможность наиболее гибкой манипуляции их энергетических уровней путём изменения геометрических размеров КТ. Примером может служить отмеченная выше задача о поведении

водородоподобной примеси, локализованной в центре сферической КТ с ограничивающим потенциалом вида [80]:

$$V_{conf}(r) = \begin{cases} 0, & r < R, \\ \infty, & r \geq R. \end{cases} \quad (2.1)$$

Авторами данной работы показано, что полная энергия такой системы сильно зависит от значения радиуса КТ. Это обусловлено тем, что в конкуренцию вступают размерное и кулоновское квантования. При малых радиусах доминирующей является положительная энергия размерного квантования, и поэтому полная энергия системы становится положительной. С другой стороны, при увеличении радиуса КТ влияние стенок ослабевает и основной вклад становится обусловлен энергией кулоновского взаимодействия электрона и примеси. Соответственно, полная энергия принимает отрицательное значение. Наконец, при определённом значении радиуса КТ кулоновское и размерное квантования “уравновешивают” друг друга и полная энергия становится равной нулю. В КТ энергия связи водородоподобной системы требует отдельного определения. Если обозначить полную энергию через E , а энергию электрона в КТ – в отсутствие примеси – через E_0 , то энергия связи E_{bind} запишется как:

$$E_{bind} = E_0 - E. \quad (2.2)$$

Важно отметить, что выражение (2.2) является универсальным для нульмерных систем, вне зависимости от их геометрии.

Наряду с изменением размеров и геометрических форм КТ распространённым механизмом манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда в КТ является воздействие внешних полей, а также гидростатического давления. Эти задачи рассмотрены в работах [89–94]. В работе [89] исследовано поведение энергии связи и поперечного сечения фотоионизации донорной примеси в цилиндрической КТ под воздействием гидростатического давления, а также электрического и магнитного полей. В [90] рассмотрено воздействие гидростатического давления и температуры на

энергию связи и поперечное сечение фотоионизации донорной примеси в КЯ с ограничивающим потенциалом Пёшля – Теллера. В работе [92] исследованы электронные состояния и прямое межзонное поглощение света в сферической КТ с модифицированным потенциалом Пёшля – Теллера под воздействием гидростатического давления и температуры.

Наряду с оптическими характеристиками КТ и нанослоёв вызывает интерес исследование диамагнитных свойств электронного газа и примесных систем в таких структурах. Эти задачи исследованы в [95–100]. Так, в работе [95] исследовано влияние одновременного воздействия статического давления, температуры и лазерного излучения на энергию связи и диамагнитную восприимчивость примеси в КТ из *GaAs*. В [96] исследовано влияние магнитного поля и лазерного излучения на диамагнитную восприимчивость донорной примеси, локализованной в КЯ. В [97] методом точной диагонализации гамильтониана рассмотрено влияние электрического поля, гидростатического давления и непараболичности зоны проводимости на энергию связи низколежащих уровней и диамагнитную восприимчивость водородоподобной примеси, локализованной в центре сферической КТ из *GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs*.

В указанных выше работах не обсуждались случаи слоистых структур. Между тем наличие внутренней границы также может сыграть важную роль в процессе управления диамагнитными свойствами примесных систем и электронного газа в нанослоях. Вторая глава диссертации посвящена описанию диамагнитных свойств примеси, расположенной в центре сферического нанослоя с ограничивающим потенциалом Кратцера, а также сферической КТ с параболическим ограничивающим потенциалом.

§2.2. Диамагнитная восприимчивость примеси в сферической системе core/shell/shell с ограничивающим потенциалом Кратцера

Исследуем диамагнитные свойства примеси, локализованной в центре сферической core/shell/shell-системы в случае, когда потенциал ограничения описывается в рамках модели молекулярного потенциала Кратцера [72]. На рис. 17 приведена форма этого потенциала.

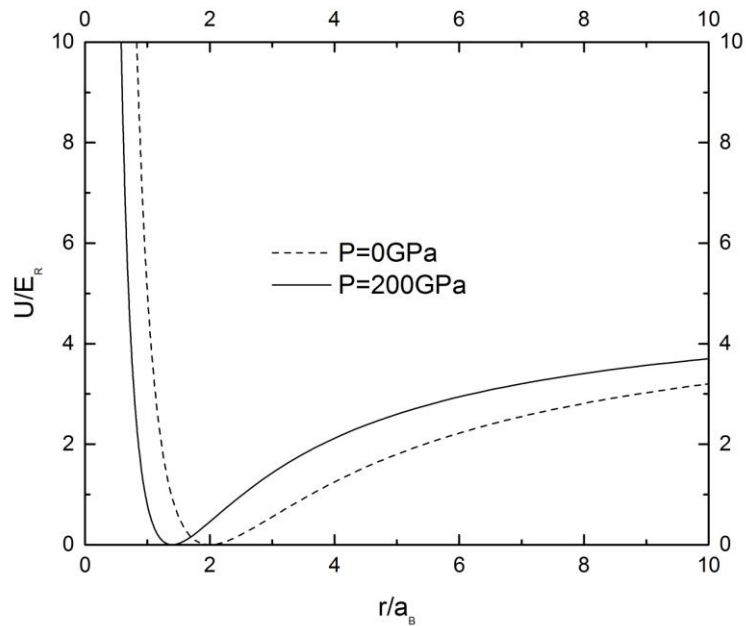


Рис. 17. Форма потенциала Кратцера ($r_0 = 2a_B$, $U_0 = 5E_R$) для двух значений гидростатического давления.

Аналитическое выражение, описывающее профиль потенциала Кратцера, задаётся выражением [72]:

$$V_{conf}(r) = \frac{\alpha}{r^2} - \frac{\beta}{r} + U_0, \quad (2.3)$$

где α , β — параметры потенциала. Эти параметры связаны с высотой ограничивающего потенциала U_0 и с точкой минимума r_0 потенциала $U(r)$ следующим образом: $\alpha = U_0 r_0^2$, $\beta = 2U_0 r_0$. Отметим, что все нижеприведённые расчёты сделаны для **GaAs** с материальными параметрами

$a_B = 104 \text{ \AA}$ – эффективный радиус Бора, $E_R^* = 5,275 \text{ мэВ}$. Как можно видеть из рис. 17, важной особенностью указанного потенциала является конечность скачка U_0 в направлении внешней границы нанослоя.

Приведём конечные результаты одночастичной задачи с кратцеровским потенциалом ограничения [72]. Волновая функция и энергетический спектр частицы задаются, соответственно, выражениями:

$$f_l = x^\lambda e^{-\beta x} {}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma'^2}{\beta}, 2\lambda; 2\beta x\right), \quad (2.4)$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \gamma'^4 \left[\nu + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \gamma'^2} \right]^{-2}, \quad (2.5)$$

где ${}_1F_1\left(\lambda - \frac{\gamma'^2}{\beta}, 2\lambda; 2\beta x\right)$ – вырожденная гипергеометрическая функция

первого рода, $\lambda = \frac{1}{2} + \sqrt{\gamma'^2 + \left(l + \frac{1}{2}\right)^2}$, $x = \frac{r}{r_0}$, $\beta^2 = -\frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} E$, $\gamma'^2 = \frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2} U_0$,

$\nu = 0, 1, 2, 3, \dots$, l – орбитальное квантовое число, μ – эффективная масса частицы, r_0 – координата минимума кратцеровского потенциала, U_0 – высота скачка потенциала, r – радиальная координата.

Стоит отметить следующую важную особенность потенциала Кратцера. Поскольку по форме потенциал является несимметричным, то, как известно из курса квантовой механики [82], при определённом значении ширины потенциала он не будет содержать ни одного связанного состояния. Последнее означает, что в такой потенциальной яме электрон не может находиться. То есть при уменьшении полуширины потенциала при её определённом значении произойдёт так называемый квантовый выброс электрона, в результате которого он уже не будет локализован внутри ямы, а перейдёт в окружающую среду.

Исходя из вышесказанного, рассмотрим сферический core/shell/shell-нанослой с ограничивающим потенциалом Кратцера, в центре

которого находится донорная примесь. Пусть на систему наложено магнитное поле $\overset{\mathbf{1}}{B}$, вектор-потенциал которого имеет вид:

$$\overset{\mathbf{r}}{A} = \left\{ A_x = -\frac{1}{2}By, A_y = \frac{1}{2}Bx, A_z = 0 \right\}. \quad (2.6)$$

Прямым вычислением можно убедиться, что $\text{div}\overset{\mathbf{1}}{A} = 0$. В этом случае гамильтониан системы запишется в следующей форме:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{eh}{\mu c} i \overset{\mathbf{r}}{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2\mu c^2} \overset{\mathbf{r}}{A}^2, \quad (2.7)$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon r} + \frac{\alpha}{r^2} - \frac{\beta}{r} + U_0 \quad (2.8)$$

есть невозмущённый гамильтониан, описывающий примесь в сферическом core/shell/shell-нанослое с ограничивающим потенциалом Кратцера. Проблема о поведении примеси в такой системе обсуждалась в работе [83], где было показано, что волновая функция и спектр электрона имеют, соответственно, следующий вид:

$$\Psi_{n_r, l, m}^{(0)} = Cr^{l'} e^{-\gamma r} {}_1F_1(l'+1-\kappa; 2l'-2; 2\gamma r) Y_{l, m}(\theta, \varphi), \quad (2.9)$$

$$E_{n_r, l}^{(0)} = U_0 - \frac{2(\beta + (e^2/\epsilon))^2 \mu}{h^2 (2n)^2}, \quad (2.10)$$

где $l' = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{(2l+1)^2 + \frac{8\mu\alpha}{h^2}} \right)$, $\kappa = \frac{e'^2 \mu}{\gamma h^2}$, $\frac{2\mu(E-U_0)}{h^2} = -\gamma^2$, $e'^2 = \beta + \frac{e^2}{\epsilon}$,

$-n_r = l' + 1 - \kappa$ – радиальное квантовое число, m – магнитное квантовое число. На основе этих выражений вычислим диамагнитную восприимчивость примеси в исследуемой системе.

Для этого вычислим поправки к невозмущённой энергии (2.10).

Гамильтониан (2.7) запишем в следующей форме:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{ehB}{2\mu c} i \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{e^2 B^2}{4\mu c^2} (x^2 + y^2).$$

Или в сферических координатах:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{eB}{2\mu c} \hat{L}_\varphi + \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} r^2 \sin^2 \theta. \quad (2.11)$$

В квадратичном и линейном по магнитному полю приближениях для энергетических поправок можем записать:

$$\Delta E_\nu = \langle \nu | \frac{eB}{2\mu c} \hat{L}_\varphi + \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} r^2 \sin^2 \theta | \nu \rangle + \sum_{\nu' \neq \nu} \frac{|\langle \nu' | \frac{eB}{2\mu c} \hat{L}_\varphi | \nu \rangle|^2}{E_\nu^{(0)} - E_{\nu'}^{(0)}}, \quad (2.12)$$

где ν и ν' есть наборы квантовых чисел, характеризующих состояние невозмущённой системы. Если электрон находится в основном состоянии 1s, то есть, когда $l=0$, то с учётом того, что собственные значения \hat{L}_φ есть $\hbar m$, для 1s-состояния ($m=0$) имеем:

$$\langle 0,0,0 | \hat{L}_\varphi | 0,0,0 \rangle = 0.$$

Поэтому возникает необходимость вычисления второго члена в (2.12):

$$E^{(2)} = C^2 \oint_{4\pi} |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 \sin^2 \theta d\Omega \int_0^\infty \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} r^{2(l_0+2)} e^{-2\gamma r} |{}_1F_1(l'+1-\kappa; 2l'-2; 2\gamma r)|^2 dr. \quad (2.13)$$

Для углового интеграла имеем [72]:

$$\frac{1}{4\pi} \oint_{4\pi} \sin^2 \theta d\Omega = \frac{2}{3}, \quad (2.14)$$

где $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$. Таким образом, для $E^{(2)}$ получим:

$$E^{(2)} = \frac{e^2 B^2}{12\mu c^2} \int_0^\infty [\psi_{n_r, l_0}^{(0)}(r)]^2 r^4 dr, \quad (2.15)$$

где $\psi_{n_r, l_0}^{(0)}(r) = Cr^{l_0} e^{-\gamma r} {}_1F_1(-n_r; 2l_0 - 2; 2\gamma r)$ – волновая функция невозмущённого гамильтониана. В частности, для состояния 1s, когда $n_r = 0$, $\psi_{0, l_0}^{(0)}(r) = Cr^{l_0} e^{-\gamma_0 r}$, а для 2s-состояния, когда $n_r = 1$, имеем

$\psi_{n_r, l'_0}^{(0)}(r) = Cr^{l'_0} e^{-\gamma_1 r} (1 - \gamma_1 r / (l'_0 - 1))$. Здесь введены следующие обозначения:

$$l'_0 = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{8\mu\alpha}{\hbar^2}} \right), \quad \gamma_0 = \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{(\beta + (e^2/\varepsilon))}{2(l'_0 + 1)}, \quad \gamma_1 = \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{(\beta + (e^2/\varepsilon))}{2(l'_0 + 2)}.$$

В рамках курса электродинамики показано, что изменение магнитного поля δB приводит к изменению плотности магнитной энергии δE :

$$\delta E = -\overset{\cdot}{M} \delta \overset{\cdot}{B}, \quad (2.16)$$

где $\overset{\cdot}{M}$ – намагниченность, индуцированная магнитным полем $\overset{\cdot}{B}$.

Предполагая, что намагниченность пропорциональна полю $\overset{\cdot}{B}$, запишем:

$$\overset{\cdot}{M} = \chi \overset{\cdot}{B}.$$

Величина χ называется магнитной восприимчивостью. Подставив это выражение в (2.16), для плотности магнитной энергии можем записать:

$$E = -\frac{1}{2} \chi B^2. \quad (2.17)$$

Если значение $\chi > 0$, то реализуется парамагнитное состояние вещества, если же $\chi < 0$, то система обладает диамагнетизмом. Отождествив макроскопическое выражение для энергии (2.17) с выражением (2.15), получим:

$$\frac{e^2 B^2}{12\mu c^2} \int_0^\infty [\psi_{n_r, l'_0}^{(0)}(r)]^2 r^4 dr = -\frac{1}{2} \chi B^2.$$

Из этого выражения следует, что для s-состояний ($l = 0$) $\chi < 0$, что означает, что реализуется исключительно диамагнитная фаза и при этом для χ_{dia} имеем следующее выражение:

$$\chi_{dia}^{n_r, l'_0} = -\frac{e^2}{6\mu c^2} \int_0^\infty \left\{ \psi_{n_r, l'_0}^{(0)}(r) \right\}^2 r^4 dr. \quad (2.18)$$

В (2.18) интеграл вычисляется аналитически и имеет вид (для произвольного значения n_r):

$$I_{n_r, l'_0} = \frac{1}{(2\gamma)^2} \frac{\Gamma(2l'_0 + 5)}{\Gamma(2l'_0 + 3)} \left\{ \left(\frac{d^{n_r}}{dh^{n_r}} \right) \left[\frac{F \left\{ l'_0 + \frac{5}{2}, l'_0 + 3, 2l'_0 + 2, \frac{A^2}{D^2} \right\}}{(1-h)^{2l'_0+2} D^{2l'_0+5}} \right] \right\}_{h=0} \cdot \quad (2.19)$$

$$\left\{ \left(\frac{d^{n_r}}{dh^{n_r}} \right) \left[\frac{F \left\{ l'_0 + \frac{3}{2}, l'_0 + 2, 2l'_0 + 2, \frac{A^2}{D^2} \right\}}{(1-h)^{2l'_0+2} D^{2l'_0+3}} \right] \right\}_{h=0}$$

Здесь введены следующие обозначения: $A^2 = \frac{4h}{(1-h)^2}$, $D = \left(1 + \frac{h}{1-h} \right)$.

Для 1s- и 2s-состояний выражение (2.19) заметно упрощается:

$$\chi_{dia}^{0, l'_0} = -\frac{e^2}{3\mu c^2} \frac{l'_0(2l'_0 + 1)}{(2\gamma_0)^2}, \quad (2.20)$$

$$\chi_{dia}^{1, l'_0} = -\frac{e^2}{3\mu c^2} \frac{l'_0(2l'_0 + 1)(l'_0{}^2 + 7l'_0 + 9)}{(2\gamma_1)^2 (l'_0 + 2)(l'_0 + 3/2)}. \quad (2.21)$$

Рассмотрим зависимость диамагнитной восприимчивости от гидростатического давления и параметров КТ. Для диамагнитной восприимчивости единицы представлены в $(a_B^2 \cdot r_e) = 4,362 \text{ \AA}^3$, где

$r_e = \frac{e^2}{\mu c^2} = 4,194 \times 10^{-4} \text{ \AA}$ – классический радиус электрона. Во всех расчётах

принята во внимание зависимость параметров μ , ε и r_0 от гидростатического давления P [98]. Эффективная масса с изменением давления P меняется как:

$$\mu(P) = \mu(0) e^{0,078P}, \quad (2.22)$$

где $\mu(0) = 0,067 * \mu_0$ (μ_0 – масса свободного электрона). Изменение диэлектрической постоянной с изменением давления задаётся как:

$$\varepsilon(P) = 13,13 - 0,088P. \quad (2.23)$$

Зависимость R_{out} (внешний радиус КТ) от P имеет вид:

$$R_{out}(P) = R_0(1 - 1,5082 \cdot 10^{-3} P). \quad (2.24)$$

Отметим, что параметр r_0 связан с внешним радиусом КТ R_{out} . Эта связь предполагается линейной, где коэффициент пропорциональности λ_{exp} определяется из экспериментальных данных. Иначе говоря, зависимость r_0 от P может быть записана как:

$$r_0(P) = \lambda_{exp} R_0(1 - 1,5082 \cdot 10^{-3} P). \quad (2.25)$$

Во всех выражениях P измеряется в GPa (гигапаскаль).

Очевидно, что изменение геометрического параметра r_0 за счет давления приводит к изменению формы профиля потенциала Кратцера. Такая зависимость проиллюстрирована на рис. 17, где показана форма потенциала в зависимости от радиальной координаты для двух разных значений гидростатического давления.

Чтобы была понятна зависимость χ_{dia} от величин P , U_0 и r_0 , сперва необходимо обсудить зависимость от этих величин формы профиля потенциала Кратцера и волновой функции. Как можно видеть из рис. 17, с увеличением гидростатического давления минимум потенциала смещается в сторону меньших значений. Это обусловлено тем фактом, что под воздействием давления происходит сжатие КТ. В свою очередь, уменьшение размеров КТ приводит к уменьшению области локализации примесного электрона.

На рис. 18(a) показана зависимость плотности вероятности локализации примесного электрона в сферическом нанослое от радиальной координаты. Как следует из рисунка, кривые, соответствующие большим значениям глубины кратцеровского потенциала U_0 , являются более ярко выраженными. Это есть следствие того, что с увеличением U_0 область локализации электрона уменьшается. Максимальное значение $|\psi_{0,l_0}^{(0)}(r)|^2$ при этом смещается в сторону больших значений радиальной координаты, так

как электрон сильнее отталкивается от внутренних стенок. Похожая ситуация наблюдается для первых пиков $2s$ -состояния (рис. 18(б)). Максимальные значения вторых пиков смещаются в сторону меньших значений радиальной координаты, так как высота правой стенки потенциала увеличивается.

На рис. 19(а) изображена зависимость диамагнитной восприимчивости от параметра r_0 для различных значений гидростатического давления. Диамагнитная восприимчивость возрастает (по модулю убывает) до определенного критического значения, после чего, с уменьшением r_0 , начинает убывать (по модулю возрастает). Необходимо отметить, что с увеличением r_0 кривые расходятся друг от друга. Поведение кривых для состояния $2s$ является аналогичным поведению кривых для состояния $1s$ (см. рис. 19(б)). Как можно видеть, $\chi_{dia}^{0,l'}$ имеет меньшие абсолютные значения, чем $\chi_{dia}^{1,l'}$. На рис. 19(а) и 19(б) во вставках приведены зависимости интегралов I_{0,l'_0} и I_{1,l'_0} . Изменение хода кривой диамагнитной восприимчивости с уменьшением параметра r_0 обусловлено квантовым выбросом электрона из КТ, после чего область локализации электрона становится больше размеров КТ.

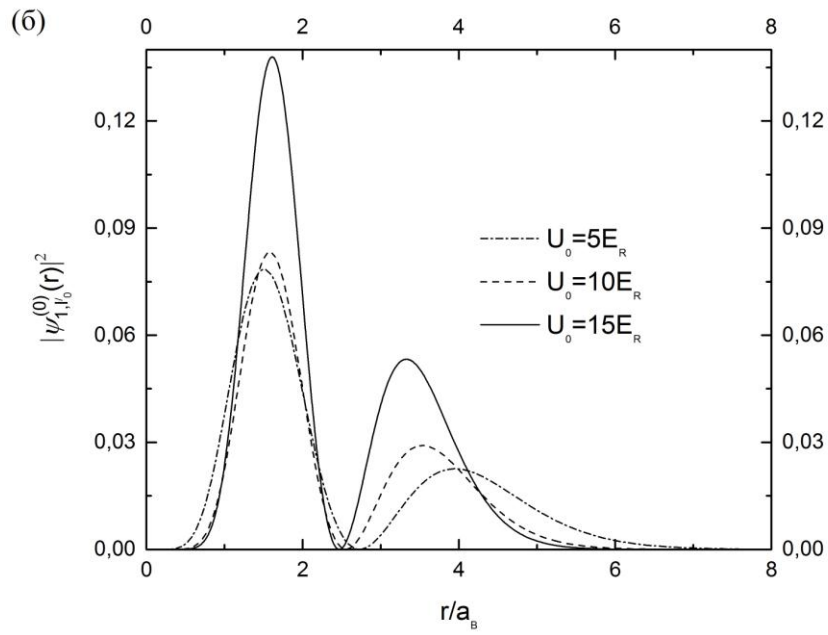
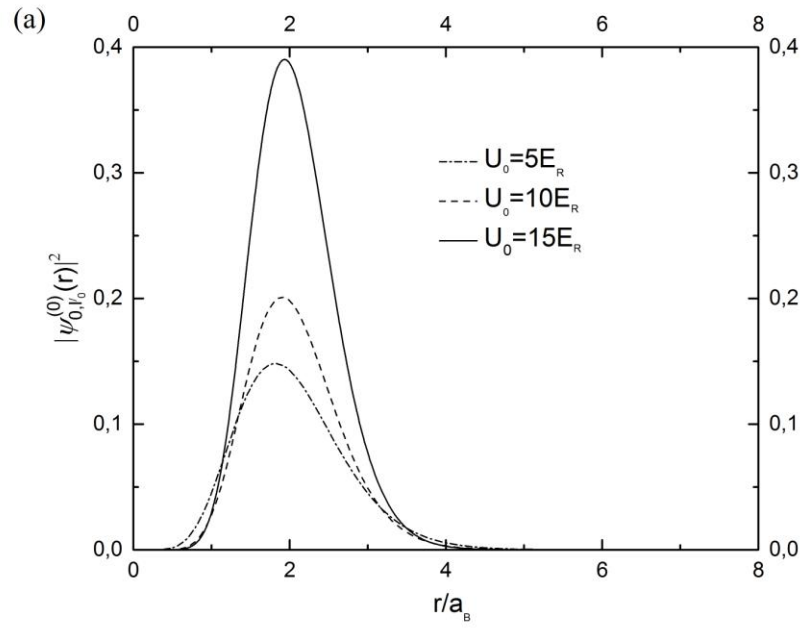


Рис. 18. Функция плотности вероятности локализации электрона для различных значений глубины потенциала U_0 для состояний (а) $1s$ и (б) $2s$.

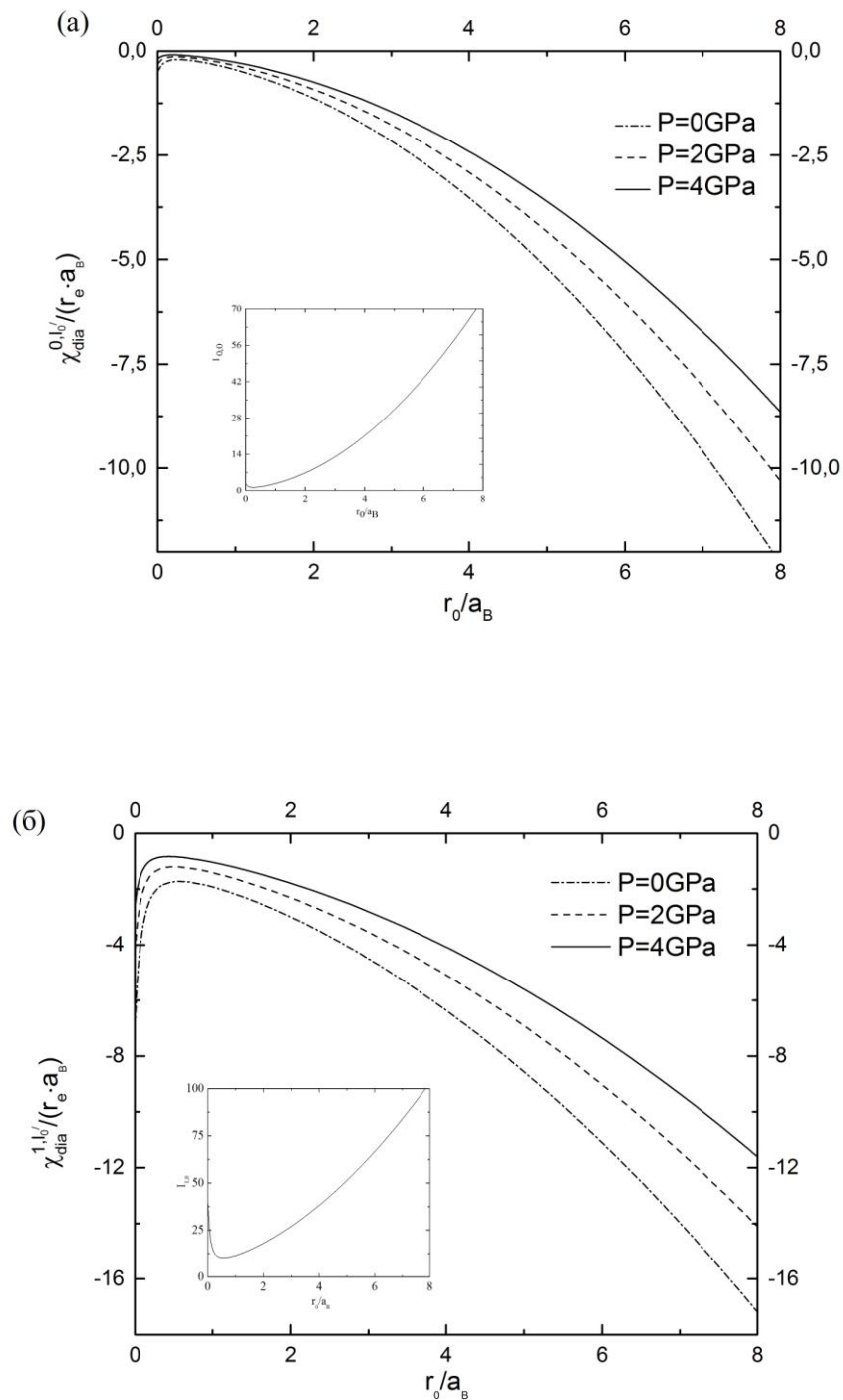
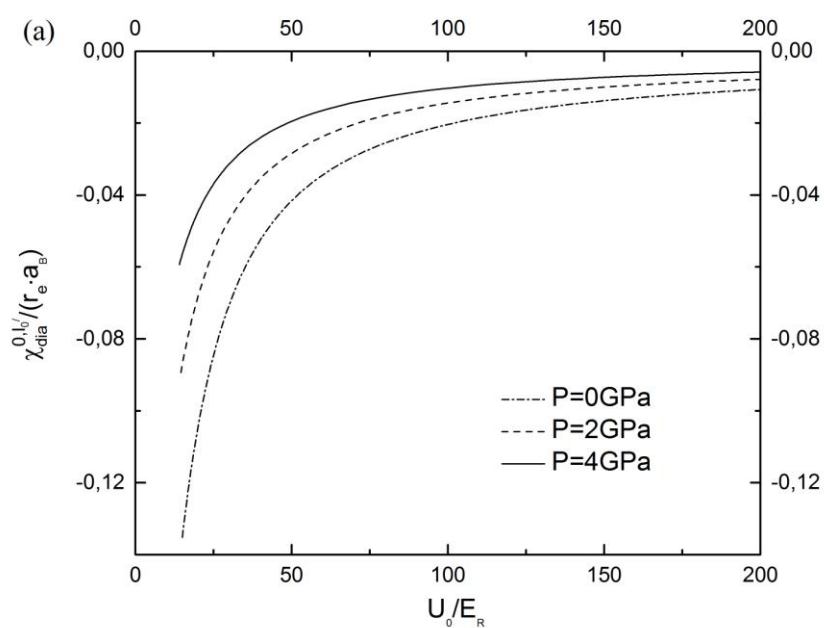


Рис. 19. Зависимость диамагнитной восприимчивости χ_{dia} от параметра r_0 для различных значений гидростатического давления для состояний (а) 1s и (б) 2s.

Рис. 20 ((а), (б)) иллюстрируют зависимость диамагнитной восприимчивости от глубины ограничивающего потенциала Кратцера. Понятно, что значение диамагнитной восприимчивости примеси определяется радиусом локализации примесного электрона (среднее

значение квадрата радиуса). В свою очередь, это значение характеризуется глубиной и шириной кратцевого потенциала. Иными словами, с увеличением U_0 абсолютное значение диамагнитной восприимчивости уменьшается, так как уменьшается область локализации электрона. Как и в предыдущем случае, здесь тоже для $2s$ -состояния абсолютные значения диамагнитной восприимчивости имеют большие значения, чем для $1s$ -состояния.



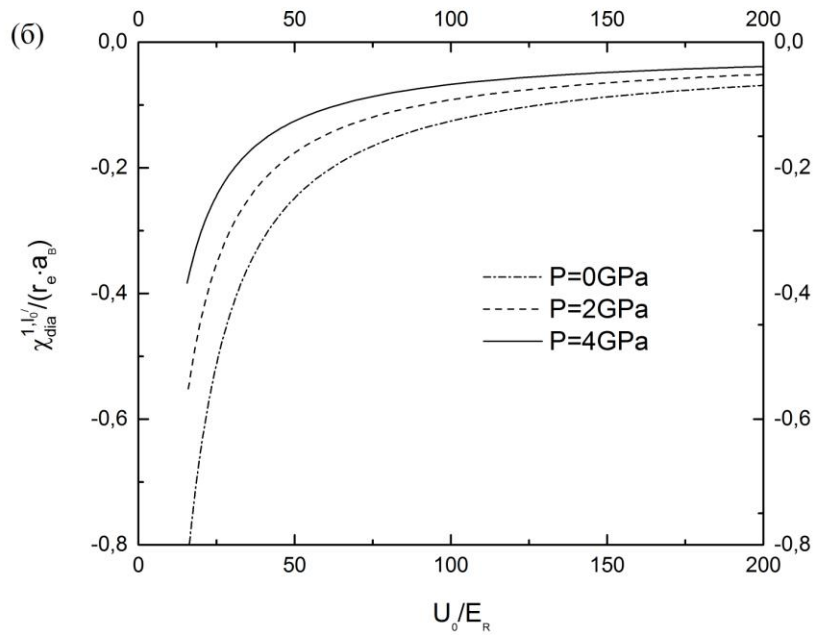


Рис. 20. Зависимость диамагнитной восприимчивости χ_{dia} от параметра U_0 для различных значений гидростатического давления P для состояний (а) 1s и (б) 2s.

Наконец, рис. 21 ((а), (б)) показывают зависимости диамагнитной восприимчивости от гидростатического давления для различных значений параметра r_0 . С увеличением P все три кривые приближаются друг к другу. Кривая, соответствующая наибольшему значению r_0 ($r_0 = 4a_B$), находится ниже кривой, соответствующей меньшим значениям r_0 , потому что в первом случае электрон локализован на большем расстоянии от примеси. Нулевое значение давления соответствует тем значениям диамагнитной восприимчивости примесного электрона, когда для минимума кратцеровского потенциала имеем $r_0 = 2a_B$, $r_0 = 3a_B$ и $r_0 = 4a_B$.

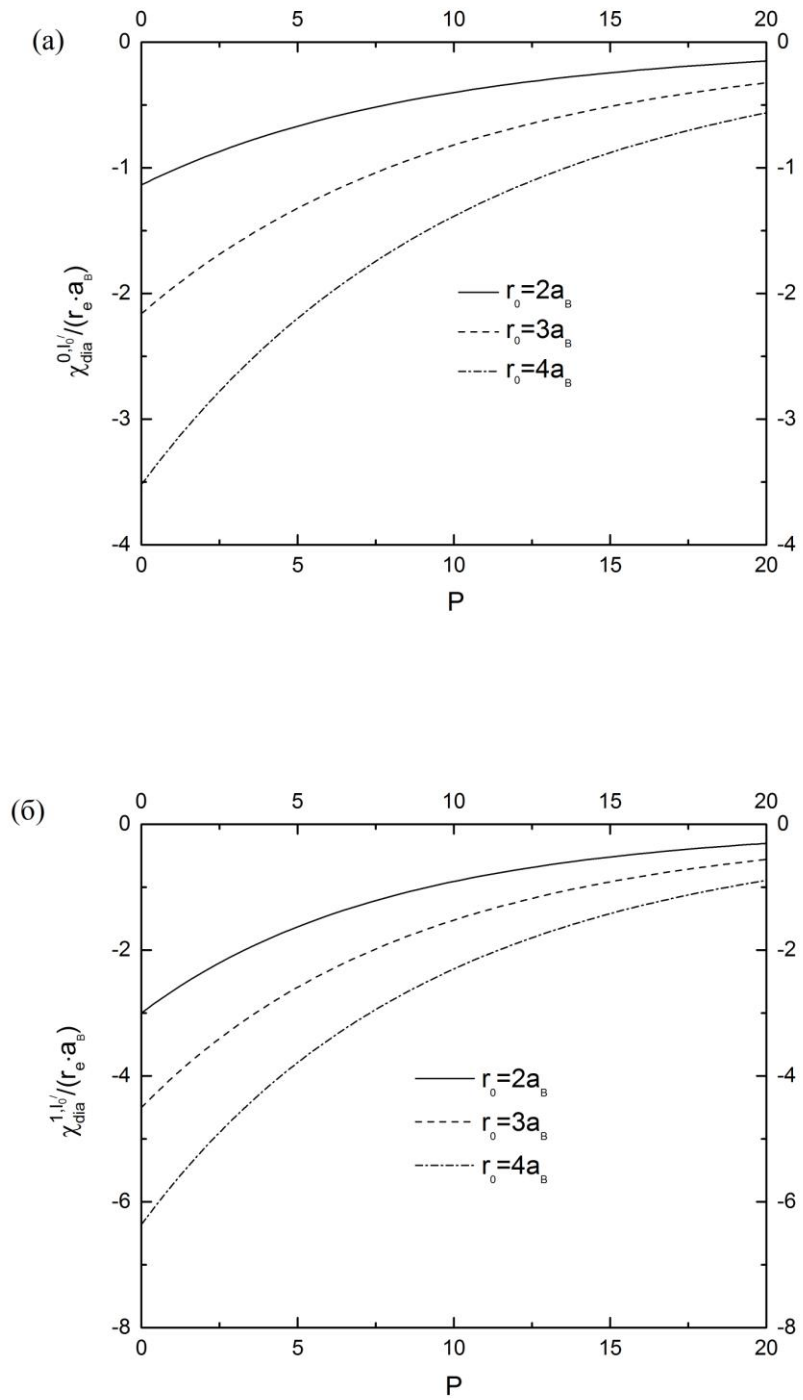


Рис. 21. Зависимости диамагнитной восприимчивости χ_{dia} от параметра P для различных значений r_0 для состояний (а) 1s и (б) 2s.

§2.3. Диамагнитная восприимчивость примеси в КТ с параболическим потенциалом ограничения

Обратимся теперь к проблеме описания диамагнитных свойств примеси, локализованной в центре сферической КТ, потенциал ограничения которой имеет параболическую форму:

$$V_{conf}(r) = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}, \quad (2.26)$$

где ω – частота ограничивающего потенциала, определяемая по формуле:

$$\omega = \gamma \frac{\hbar}{\mu R^2},$$

где γ – подгоночный параметр.

Пусть на систему наложено внешнее магнитное поле \vec{B} , направленное вдоль оси z . Гамильтониан системы будет иметь вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left(\hat{P} - \frac{e\mathbf{u}}{c} A \right)^2 + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} - \frac{Ze^2}{\epsilon r}, \quad (2.27)$$

где Z – заряд примеси. Калибровку вектор-потенциала выберем в виде (2.6). Снова, считая влияние поля возмущением, для невозмущённого гамильтониана при $Z=1$ можем записать:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon r} + \frac{\mu\omega^2 r^2}{2}. \quad (2.28)$$

Волновая функция для этого гамильтониана ищется как произведение:

$$\Psi_{n,l,m}^{(0)}(r, \theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) \psi_{n,l}(r). \quad (2.29)$$

Подстановка (2.29) в (2.28) приводит к следующему выражению для гамильтониана в безразмерных величинах:

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \beta\rho^2 - \frac{2}{\rho}, \quad (2.30)$$

где $\rho = \frac{r}{a_B}$, $\beta = \frac{\hbar\omega}{2E_R^*}$. Учитывая, что частота квантового осциллятора

$\omega = \gamma \frac{\hbar}{\mu R^2}$ обратно пропорциональна квадрату радиуса квантовой структуры

(в нашем случае R есть радиус сферической КТ) из вышеприведённого

выражения для β , находим $\beta = \frac{\hbar^2}{\mu R^2} / 2E_R^*$, откуда следует, что $\beta = \frac{1}{R^{*2}}$, где

$R^* = \frac{R}{a_B}$ – радиус КТ в безразмерных величинах. Таким образом, β имеет

смысл величины, обратной квадрату радиуса КТ.

Для нахождения волновой функции основного состояния невозмущённого гамильтониана (2.30) воспользуемся методом вариации. По аналогии с работой [101] пробную волновую функцию будем искать в виде:

$$\psi_{n_r=0}(\rho, \lambda) = C(\lambda) \exp\left(-\frac{\beta\rho^2}{\lambda}\right) \exp(-\lambda\rho), \quad (2.31)$$

где λ – вариационный параметр, $C(\lambda)$ – зависящий от него нормировочный множитель. Подобный выбор обусловлен следующим обстоятельством: на малых расстояниях преобладающим должен быть кулоновский потенциал, а на больших расстояниях доминирующей должна быть роль параболического ограничивающего потенциала. Из условия нормировки $\langle \psi_{n_r=0}^* | \psi_{n_r=0} \rangle = 1$ для $C(\lambda)$ находим:

$$C(\lambda) = \sqrt{\frac{16(\beta/\lambda)^{5/2}}{-2\lambda\sqrt{\beta/\lambda} + (\beta/\lambda + \lambda^2) e^{\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\beta/\lambda}}} \sqrt{2\pi} \operatorname{Erfc}\left[\frac{\lambda}{\sqrt{2\beta/\lambda}}\right]}}, \quad (2.32)$$

где $\operatorname{Erfc}\left[\frac{\lambda}{\sqrt{2\beta/\lambda}}\right]$ – дополнительная функция ошибок. Окончательно для

$\psi_{n_r=0}(\rho, \lambda)$ имеем:

$$\psi_{n_r=0}(\rho, \lambda) = \frac{16(\beta/\lambda)^{5/2}}{\sqrt{-2\lambda\sqrt{\beta/\lambda} + (\beta/\lambda + \lambda^2)e^{\frac{\lambda^2}{2\sqrt{\beta/\lambda}}}\sqrt{2\pi}\operatorname{Erfc}\left[\frac{\lambda}{\sqrt{2\beta/\lambda}}\right]}} \cdot \exp\left(-\frac{\beta\rho^2}{\lambda}\right)\exp(-\lambda\rho). \quad (2.33)$$

Определим значение параметра λ . Для этого необходимо определить минимальное значение выражения $I(\lambda, \beta)$:

$$I(\lambda, \beta) = \frac{\langle \Psi^* | \hat{H}_{rad} | \Psi \rangle}{\langle \Psi^* | \Psi \rangle} \rightarrow \min. \quad (2.34)$$

После вычислений для $I(\lambda, \beta)$ получим (при $Z=1$):

$$I(\lambda, \beta) = \frac{-2\sqrt{\beta}(2\beta + 3\beta\lambda + \lambda^3) + e^{\frac{\lambda^2}{\beta}}\sqrt{\pi}(3\beta^2 + 2\lambda^4 + \beta\lambda(4 + 7\lambda))\operatorname{Erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}}\right)}{-2\sqrt{\beta}\lambda + e^{\frac{\lambda^2}{\beta}}\sqrt{\pi}(\beta + 2\lambda^2)\operatorname{Erfc}\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\beta}}\right)}. \quad (2.35)$$

Для данного β из условия $\frac{dI}{d\lambda} = 0$ можно определить λ , соответствующее минимальному значению $I(\lambda, \beta)$. Подставляя это значение в (2.33), можно рассчитать диамагнитную восприимчивость изучаемой примесной системы. На рис. 22 приведена зависимость λ_{\min} от β . Эта зависимость аппроксимируется следующим выражением:

$$\lambda_{\min} = \alpha_1 + \frac{\alpha_2}{\alpha_3 + \beta}, \quad (2.36)$$

где $\alpha_1 \approx 0,572869$, $\alpha_2 \approx 0,146247$, $\alpha_3 \approx 0,408591$.

Диамагнитная восприимчивость определяется так же, как и в предыдущем параграфе:

$$\chi_{dia}^{0,0} = -\frac{e^2}{6\mu c^2} \int_0^\infty \left\{ \psi_{n_r}^{(0,0)}(\rho, \lambda) \right\}^2 \rho^4 d\rho. \quad (2.37)$$

Подставляя (2.33) в (2.37), получим:

$$\chi_{dia}^{0,0} = -\frac{e^2}{6\mu c^2} \frac{-2\lambda\sqrt{\beta/\lambda}(5\beta/\lambda + \lambda^2) + (3(\beta/\lambda)^2 + 6\lambda\beta + \lambda^4)e^{\frac{\lambda^2}{2\beta/\lambda}}\sqrt{2\pi}\text{Erfc}\left[\frac{\lambda}{\sqrt{2\beta/\lambda}}\right]}{4(\beta/\lambda)^2\left(-2\lambda\sqrt{\beta/\lambda} + (\sqrt{\beta/\lambda} + \lambda^2)e^{\frac{\lambda^2}{2\beta/\lambda}}\sqrt{2\pi}\text{Erfc}\left[\frac{\lambda}{\sqrt{2\beta/\lambda}}\right]\right)}.$$

(2.38)

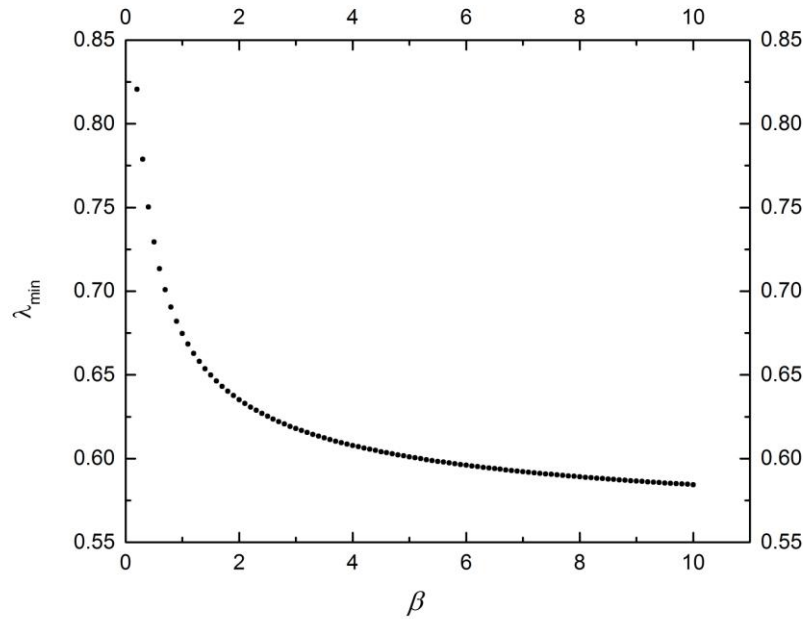


Рис. 22. Зависимость λ_{\min} от параметра параболического потенциала β (при $Z = 1$).

На рис. 23 приведена зависимость диамагнитной восприимчивости примеси, находящейся в основном состоянии, от радиуса КТ R^* . Диамагнитная восприимчивость представлена в тех же безразмерных единицах, что и в предыдущем параграфе. Как следует из вышесказанного, с увеличением области локализации электрона абсолютное значение диамагнитной восприимчивости возрастает. Поскольку при $R^* \rightarrow \infty \Rightarrow \omega \rightarrow 0$, то при больших значениях эффективного радиуса КТ реализуется случай примесного электрона в массивном образце и, следовательно, диамагнитная восприимчивость стремится к постоянному значению, что и следует из рис. 23. Как уже было показано (рис. 19(а)), в случае кратцеровского

потенциала ограничения подобной картины не наблюдается, так как с увеличением внешнего радиуса R_{out} наносля примесный электрон постоянно ощущает влияние внутренней бесконечно высокой стенки потенциала. Поэтому абсолютное значение диамагнитной восприимчивости в этом случае монотонно возрастает.

Другое отличие поведения примесного электрона в КТ с кратцеровским и параболическим ограничивающими потенциалами заключается в том, что в связи с бесконечностью высоты стенок параболического потенциала здесь невозможно наблюдать квантовый выброс электрона из КТ, поэтому при $R^* = 0$ диамагнитная восприимчивость также становится равной нулю, как это видно из рис. 23.

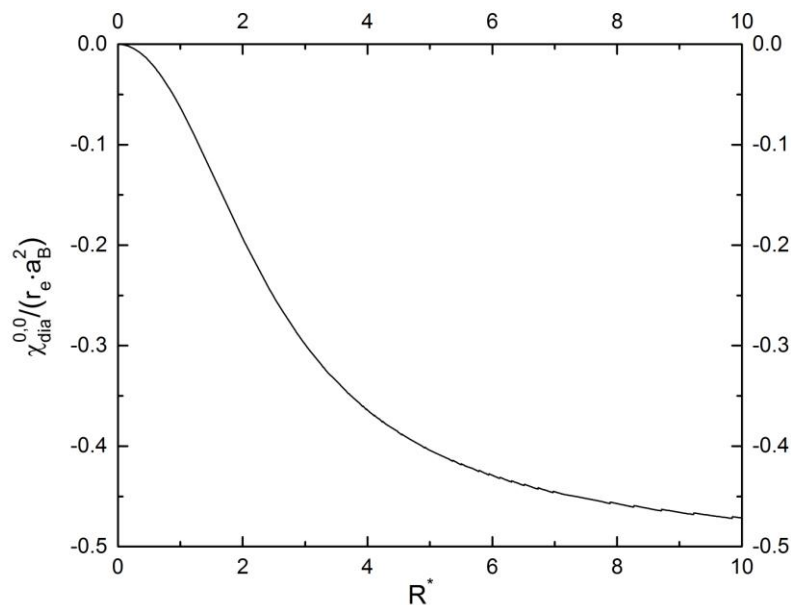


Рис. 23. Зависимость диамагнитной восприимчивости для 1s-состояния от эффективного радиуса КТ.

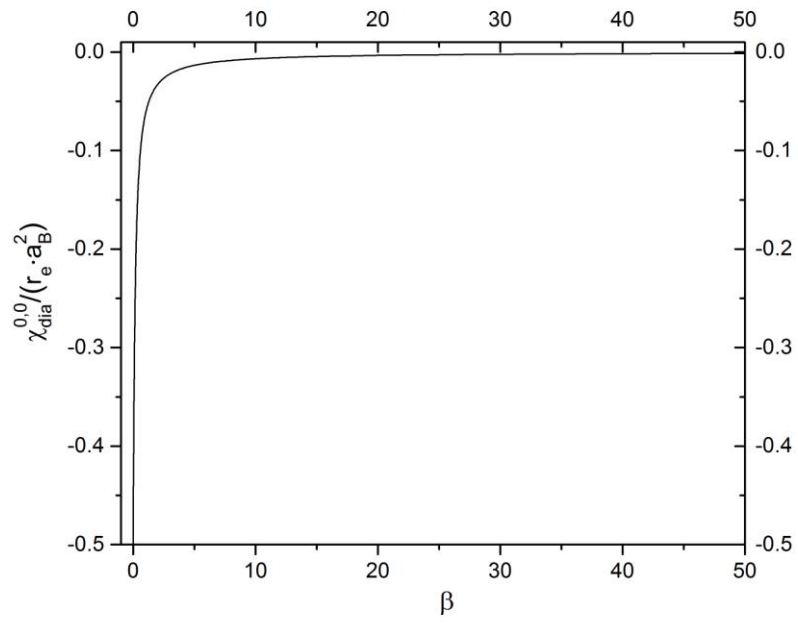


Рис. 24. Зависимость диамагнитной восприимчивости для 1s-состояния от параметра параболического потенциала β .

ГЛАВА III

НЕЗАТУХАЮЩИЙ ОРБИТАЛЬНЫЙ ТОК И ТОК СПИНОВОГО МАГНИТНОГО МОМЕНТА ЭЛЕКТРОНА В РАЗЛИЧНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ ПРИ НАЛИЧИИ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

§3.1. Введение

В предыдущих главах основное внимание было уделено вопросам манипуляции энергетическими уровнями носителей заряда в КТ различных геометрических форм и размеров. Наряду со спектральными характеристиками КТ большой интерес вызывает проблема управления спиновыми состояниями носителей заряда в таких системах. Результаты, полученные в процессе изучения спиновых характеристик КТ, могут найти своё непосредственное приложение в бурно развивающейся области – спинтронике. Будучи сугубо квантовой характеристикой, спин обладает весьма интересными свойствами, манипуляция которыми позволяет решать задачи как оперативной памяти компьютеров, так и построения алгебры вычислений для квантовой информатики [102–106]. Примером сказанного является квантовая запутанность в неколичественных квантовых системах [107–109], квантовая телепортация [110–114], возможность манипуляции временем обмена состояний в двухэлектронных системах [115–117].

Как известно, спин электрона естественным образом возникает из релятивистского уравнения Дирака. При этом спин является неотделимой характеристикой электрона наравне с зарядом и массой. Исходя из сказанного, можно утверждать, что наличие спина должно определённым образом проявляться в релятивистском выражении для тока, которое получается путём анализа уравнения Дирака. Релятивистски-инвариантное выражение для плотности тока в теории Дирака даётся соотношением [118]:

$$\mathbf{j} = -ec\psi^+ \boldsymbol{\alpha} \psi, \quad (3.1)$$

где четырёхкомпонентные функции ψ и ψ^+ имеют, соответственно, вид

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (\text{биспинор Дирака}), \quad \psi^+ = (\psi_1^+ \psi_2^+ \psi_3^+ \psi_4^+), \quad c - \text{ скорость света,}$$

e – заряд электрона, α – матрицы Дирака, выражающиеся через матрицы Паули следующим образом:

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix}$$

где $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ – матрицы Паули. Из данного

выражения сложно сделать вывод относительно роли и вклада спина в общее выражение для тока. Однако при переходе к уравнению Паули выражение для тока заметно упрощается и при наличии магнитного поля принимает форму [117]:

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2\mu_0} \left[(\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*\nabla\Psi \right] - \frac{e^2}{\mu_0 c^2} \mathbf{A}\Psi^*\Psi + \mu_B \text{crot} \left(\Psi^* \frac{\mathbf{u}}{\hbar} \Psi \right), \quad (3.2)$$

где μ_0 – масса свободного электрона, e – заряд электрона,

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2\mu_0 c}$ – магнетон Бора, \mathbf{A} – вектор-потенциал напряжённости

магнитного поля. Первый член в этом выражении есть незатухающий орбитальный ток $\overset{1}{j}_{Orb}$. Второй член характеризует вклад внешнего магнитного поля в орбитальный ток. Последний член в (3.2) называется током спинового магнитного момента $\overset{1}{j}_{SMM}$. Данный ток не связан с перемещением заряда частицы, а обусловлен наличием собственного магнитного момента у электрона (μ_B) и, подобно току смещения в уравнениях Максвелла, свидетельствует о наличии ненулевого тока даже при отсутствии движущихся зарядов.

Ток спинового магнитного момента проявляет себя в различных системах. Так, в работе [119] вычислен ток спинового магнитного момента в атоме водорода. Показано, что для 1s- и 2s-состояний орбитальный ток обнуляется и присутствует только ток спинового магнитного момента. В [120] проведено сравнение расчётов углового момента в дираковском и в электромагнитном поле. Сравнение показывает, что спин электрона полностью аналогичен угловому моменту, переносимому классической, круговой, поляризованной волной. Оптическим аналогом орбитального тока и тока спинового магнитного момента может служить распространение оптической волны в различных средах с учётом поляризации света. При этом роль орбитального тока играет вектор Пойнтинга, а роль спина может играть поляризация [121]. В [122] рассмотрено влияние спина электрона на изменение квантомеханического выражения для уравнения непрерывности, описывающего плотность потока вероятности.

Ясно, что в КТ ток спинового магнитного момента также будет себя проявлять. В данной главе изучается специфика этого тока в кольцеобразной и сферической КТ. При этом если в квантовом кольце обсуждается одноэлектронное состояние, то для сферической КТ изучается природа тока спинового магнитного момента при наличии примесного центра.

§3.2. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в цилиндрическом нанослое при наличии внешнего магнитного поля

Обсудим поведение электрона в цилиндрическом нанослое с ограничивающим потенциалом:

$$V_{Conf}(\rho, z) = \begin{cases} 0, & R_1 < \rho < R_2, |z| < \frac{L}{2}, \\ \infty, & \rho \leq R_1, \rho \geq R_2, |z| \geq \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (3.3)$$

где L – высота цилиндрического нанослоя, R_1 и R_2 , соответственно, внутренний и внешний радиусы (рис. 12). Калибровку вектор-потенциала \mathbf{A} внешнего, однородного, аксиального магнитного поля выберем следующим образом:

$$\mathbf{A} = \left\{ A_\rho = A_z = 0, A_\varphi = \frac{B\rho}{2} \right\}. \quad (3.4)$$

Для вышеприведённой калибровки в уравнении Шрёдингера можно произвести разделение переменных. Это значит, что волновую функцию электрона можно представить в виде:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = g(\rho, \varphi) f(z). \quad (3.5)$$

С учётом спина электрона можно записать следующее трёхмерное уравнение Шрёдингера:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{i\hbar\omega_c}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\mu\omega_c^2}{8} \rho^2 + V_{conf}(\rho, z) - \mu_B^* B \hat{\sigma}_z \right\} g(\rho, \varphi) f(z) \chi_{s_z} = E_{n,\rho,m,s_z} \Psi(\rho, \varphi) f(z) \chi_{s_z} \quad (3.6)$$

с граничными условиями

$$\Psi \Big|_{z=\pm \frac{L}{2}} = \Psi \Big|_{\rho=R_1} = \Psi \Big|_{\rho=R_2} = 0, \quad (3.7)$$

где χ_s – спиновая часть волновой функции, μ_B^* – эффективный магнитный момент электрона (для **GaAs** $\mu_B^* = g_L \mu_B$, $g_L = 0,44$), $\hat{\sigma}_z$ есть z -компонента матриц Паули, $\omega_c = \frac{eB}{\mu c}$ – циклотронная частота, $\mu = 0,067\mu_0$ – эффективная масса электрона. Для z -представления матрицы Паули можно записать в виде:

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \chi_{s_z=\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Уравнение (3.6) является аналитически решаемым. После соответствующих расчётов для волновой функции $\Psi_{n_\rho, m}^{n, s_z}(\rho, \varphi, z, s_z)$ можно записать следующее выражение:

$$\Psi_{n_\rho, m}^{n, s_z}(\rho, \varphi, z, s_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \sqrt{\frac{2}{L}} \left\{ \begin{array}{l} \sin \frac{\pi n}{L} z (n = 2k, k = 0, 1, 2, \dots) \\ \cos \frac{\pi n}{L} z (n = 2k + 1, k = 0, 1, 2, \dots) \end{array} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \psi(\rho), \quad (3.9)$$

где $m = 0; \pm 1; \pm 2; \dots$ – магнитное квантовое число, n_ρ – радиальное квантовое число, n – число, характеризующее квантование в z -направлении. После подстановки (3.9) в (3.6) получаем уравнение для радиальной волновой функции, решение которого после введения обозначений $\beta = \frac{E - E_n}{\hbar \omega_c} - \frac{m}{2}$,

$a_M = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega_c \mu}}$ (магнитная длина) могут быть записаны как:

$$\psi(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\frac{\rho^2}{4a_M^2}} \left\{ C_1 \cdot {}_1F_1 \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_M^2} \right) + C_2 \cdot U \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_M^2} \right) \right\}, \quad (3.10)$$

где ${}_1F_1$ и U есть вырожденные гипергеометрические функции первого и второго родов соответственно. На рис. 25 изображено распределение плотности вероятности электрона в нанослое. Как следует из этого рисунка, вероятность нахождения электрона максимальна в центре.

Чтобы найти энергетический спектр для основного состояния, необходимо учесть радиальные граничные условия (3.3) и решить следующее трансцендентное уравнение:

$$\left| \begin{array}{l} {}_1F_1 \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right) U \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right) \\ {}_1F_1 \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_2^2}{2a_c^2} \right) U \left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_2^2}{2a_c^2} \right) \end{array} \right| = 0. \quad (3.11)$$

Как результат, для спектра энергии получаем:

$$E_{n,m} = \hbar \omega_c \left(\beta + \frac{m}{2} \right) + E_n, \quad (3.12)$$

где β определяется численно из уравнения (3.11).

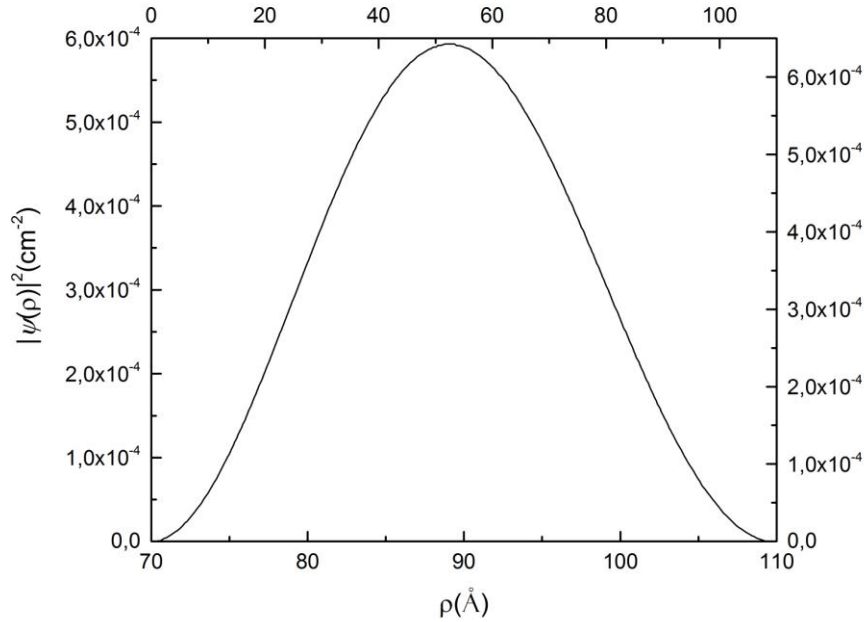


Рис. 25. Распределение плотности вероятности электрона при $\vec{B} = 10^4 Oe$.

На основе полученных результатов можно рассчитать плотности орбитального тока, тока спинового магнитного момента и полного тока \vec{j}_{Tot} для обсуждаемой системы. Полный ток при этом задаётся выражением (3.2).

Как было сказано, орбитальный ток имеет вид:

$$\vec{j}_{orb} = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi \right) - \frac{e^2}{\mu c} \vec{A} |\Psi|^2. \quad (3.13)$$

Рассмотрим подробнее выражение в скобках.

$$\begin{aligned} \Psi \vec{\nabla} \Psi^* - \Psi^* \vec{\nabla} \Psi &= \Psi \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \vec{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z \right) \Psi^* - \Psi^* \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \vec{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z \right) \Psi = \\ &= \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \rho} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) \vec{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \varphi} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_\varphi + \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial z} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) \vec{e}_z \end{aligned} \quad (3.14)$$

Первый и третий члены в (3.14) равны нулю, так как радиальная и z -компоненты волновой функции Ψ являются вещественными функциями. Отличным от нуля является только второй член, который, в свою очередь, равен:

$$\frac{1}{\rho} \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \varphi} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} \right) e_\varphi = \frac{1}{\rho} \left(-im|\Psi|^2 - im|\Psi|^2 \right) e_\varphi = -\frac{2im}{\rho} |\Psi|^2 e_\varphi. \quad (3.15)$$

Таким образом, для компонент орбитального тока окончательно можно записать:

$$\begin{aligned} \left(\overset{1}{j}_{Orb} \right)_\rho &= 0, \quad \left(\overset{1}{j}_{Orb} \right)_z = 0, \\ \left(\overset{r}{j}_{Orb} \right)_\varphi &= \left(\frac{ehm}{\mu\rho} - \frac{e^2 B}{2\mu c} \rho \right) |g(\rho, \varphi)|^2 |f(z)|^2. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Как видно, орбитальный ток имеет две компоненты. Если мы учтём, что hm есть орбитальный момент, характеризующий состояние с квантовым числом m , то ясно, что первый член в формуле (3.16) характеризует ток, обусловленный орбитальным движением электрона. В свою очередь, $\frac{eB}{\mu c}$ есть циклотронная частота электрона. Произведение циклотронной частоты и ρ характеризует циклотронное движение электрона. Поэтому второй член – это циклотронная часть тока, описывающая вклад магнитного поля в $\overset{1}{j}_{Orb}$.

Как можно заметить из формулы (3.16), когда $\frac{ehm}{\mu\rho} = \frac{e^2 B}{2\mu c} \rho$ орбитальный ток в нанослое становится равным нулю. То есть при значениях радиальной координаты электрона, равных $\rho_m = \sqrt{2|m|} a_c$, происходит обнуление $\overset{1}{j}_{Orb}$. Обсудим это более детально. Так как мы рассматриваем электрон, запишем это уравнение как $-\frac{|e|hm}{\mu\rho} = \frac{e^2 B}{2\mu c} \rho$. Для выполнения этого равенства должно быть удовлетворено одно из следующих двух условий:

- 1) $m > 0$ и $\vec{B} \uparrow \downarrow O_z$, которое означает, что \vec{B} имеет противоположное по отношению к оси O_z направление.
- 2) $m < 0$ и $\vec{B} \uparrow \uparrow O_z$, которое, соответственно, означает, что \vec{B} имеет одинаковое с осью O_z направление.

Отметим, что для каждого фиксированного значения m есть своё собственное значение ρ_m . Таким образом, для заданного значения магнитного поля $|\vec{B}|$ на расстоянии, равном $\rho_m = \sqrt{2|m|}a_M$, если реализован один из двух вышеуказанных случаев, имеются две противоположно направленные компоненты орбитального тока, вследствие чего он становится равным нулю, как это было отмечено ранее. С физической точки зрения это явление может быть объяснено следующим образом. С увеличением ρ вклад энергии, обусловленный угловым моментом, уменьшается, однако, в то же время растёт вклад энергии циклотронного вращения. Для радиусов, больших, чем ρ_m , направление вращения главным образом становится обусловлено магнитным полем \vec{B} . В таблицах 1 и 2 приведены несколько значений ρ_m для различных \vec{B} и m .

Таблица 1.

$$m = 1$$

| $\left \frac{\mathbf{u}}{B} \right (Oe)$ | $\rho_m (\text{Å})$ |
|--|---------------------|
| $-1,1 * 10^5$ | 109,43 |
| $-1,5 * 10^5$ | 93,71 |
| $-1,9 * 10^5$ | 83,26 |
| $-2,3 * 10^5$ | 75,68 |
| $-2,65 * 10^5$ | 70,50 |

Таблица 2.

$$\left| \frac{\mathbf{u}}{B} \right| = 2,65 * 10^5 Oe$$

| m | $\rho_m (\text{Å})$ |
|-----|---------------------|
| 1 | 70,50 |
| 2 | 99,71 |
| 3 | 122,12 |
| 4 | 141,01 |
| 5 | 157,65 |

Для того чтобы вычислить плотности орбитального тока и тока спинового магнитного момента, сперва необходимо найти постоянные интегрирования в выражении (3.10), поэтому мы должны использовать граничные условия (3.11). Исходя из этого, для данных коэффициентов получим следующие выражения:

$$C_2 = - \frac{{}_1F_1 \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right)}{U \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right)} C_1, \quad (3.17)$$

откуда, используя условия нормировки, находим, что:

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{\int_{R_1}^{R_2} \rho^{2|m|} e^{-\frac{\rho^2}{2a_c^2}} \left(\frac{{}_1F_1 \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_c^2} \right)}{U \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right)} - \frac{{}_1F_1 \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right)}{U \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{R_1^2}{2a_c^2} \right)} U \left(- \left(\beta - \frac{|m|+1}{2} \right), m+1, \frac{\rho^2}{2a_c^2} \right) \right)^2 \rho d\rho}}. \quad (3.18)$$

На рис. 26 изображена зависимость орбитального тока от радиальной координаты для основного состояния электрона ($n = 1, m = 0$). Подробнее обсудим поведение плотности этого тока, когда $L = 500 \text{ Å}$, $R_1 = 70 \text{ Å}$,

$R_2 = 110 \text{ \AA}$. Как можно видеть, модуль плотности орбитального тока полностью повторяет радиальное распределение электрона в нанослое, что естественно. Так как мы обсуждаем состояние $m=0$, орбитальный ток отрицателен и его профиль имеет повёрнутую форму плотности вероятности радиального распределения.

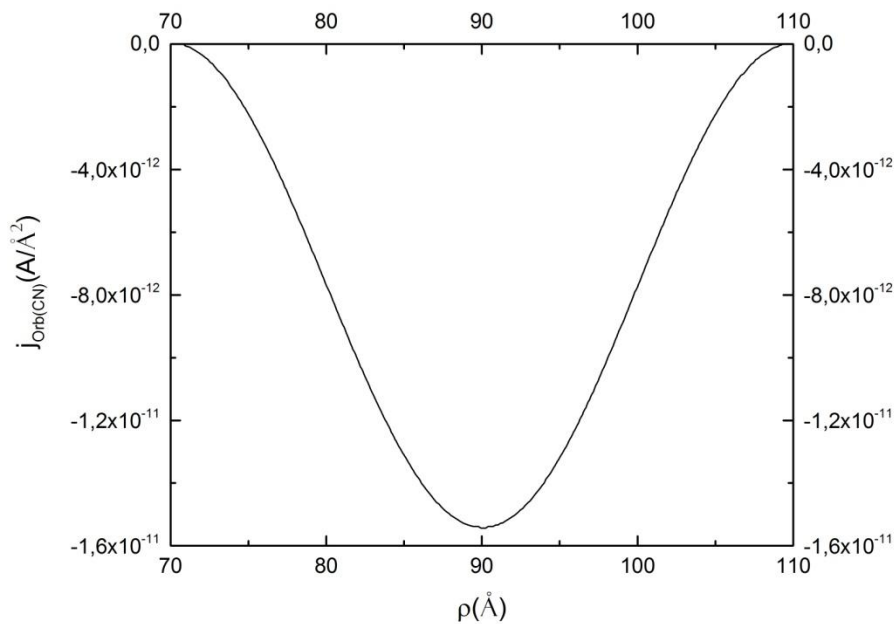


Рис. 26. Зависимость орбитального тока для состояния $m=0$ от радиальной координаты для квантового цилиндрического нанослоя при $\vec{B} = 10^4 \text{ Oe}$.

Перейдём к рассмотрению тока спинового магнитного момента. Принимая во внимание форму матриц Паули и волновую функцию χ_s , сперва необходимо рассчитать компоненты следующего вектора:

$$\vec{f} = \mu_B^* \Psi^* \hat{\sigma} \Psi. \quad (3.19)$$

В цилиндрической системе координат матрицы Паули имеют следующий вид:

$$\hat{\sigma}_\rho = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

При этом средние значения векторов $\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\rho$, $\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\varphi$, $\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_z$ будут соответственно равны:

$$\begin{aligned}\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\rho &: (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \\ \left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\varphi &: (1 \ 0) \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0, \\ \left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_z &: (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1.\end{aligned}\tag{3.21}$$

Таким образом, можно записать:

$$\begin{aligned}\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\rho &= \left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\varphi = 0, \\ \left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_z &= 2\mu_B^* s_z |g|^2 |f|^2.\end{aligned}\tag{3.22}$$

То есть отличной от нуля является только z -компонента $\left(\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_z$. Так как произведение $(|\psi|^2 |f|^2)$ зависит только от ρ - и z -координат, покажем, что отличной от нуля будет только φ -компонента вектора $rot\overset{\mathbf{f}}{\sigma}$.

$$\begin{aligned}\left(rot\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\rho &= 0, \\ \left(rot\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_\varphi &= -\frac{\partial}{\partial\rho} \overset{\mathbf{f}}{\sigma}_z, \\ \left(rot\overset{\mathbf{f}}{\sigma}\right)_z &= 0.\end{aligned}\tag{3.23}$$

Таким образом, для ρ -, φ - и z -компонент плотности тока спинового магнитного момента можно записать:

$$\left(\overset{\mathbf{r}}{j_{SMM}}\right)_\rho = 0, \left(\overset{\mathbf{r}}{j_{SMM}}\right)_\varphi = -2\mu_B^* c s_z \frac{\partial}{\partial\rho} |g|^2 |f|^2, \left(\overset{\mathbf{r}}{j_{SMM}}\right)_z = 0.\tag{3.24}$$

С учётом вышеприведённых расчётов для плотности полного тока можно записать:

$$\left(\overset{\mathbf{r}}{j_{tot}}\right)_\varphi = \left(\frac{ehm}{\mu\rho} - \frac{e^2 B}{2\mu c} \rho\right) |g|^2 |f|^2 - 2\mu^* c s_z \frac{\partial}{\partial\rho} |g|^2 |f|^2.\tag{3.25}$$

Эти результаты полностью ожидаемы, потому что в z - и ρ -направлениях движение носителей заряда ограничено. С другой стороны, мы имеем периодическое “вращение” частицы вокруг оси Oz , которое и создаёт циклический ток.

Нужно отметить, что по сравнению со случаем квантовой нити рассмотрение квантования вдоль оси Oz приводит к исчезновению орбитального тока в направлении магнитного поля. С другой стороны, в выражениях как орбитального тока, так и тока спинового магнитного момента наличие квантования вдоль Oz -направления выражается присутствием фактора $|f|^2$. Поэтому для одного и того же значения ρ ток будет иметь различные значения в зависимости от того, в какой именно плоскости $z = const$ он рассматривается. При этом

$$|f|^2 = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} z\right) (n - \text{чётное}) \\ \frac{2}{L} \cos^2\left(\frac{\pi n}{L} z\right) (n - \text{нечётное}) \end{cases}. \quad (3.26)$$

Это означает, что вдоль оси Oz цилиндрического нанослоя есть плоскости, где полный ток равен нулю. Эти плоскости соответствуют нулям фактора $|f|^2$. Рассмотрим два случая: один для чётных значений и другой для нечётных. К примеру, когда $n = 6$, мы должны рассмотреть

$|f|^2 = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi n}{L} z\right)$. Тогда должны быть семь плоскостей, в которых полный ток будет равен нулю. z -координаты этих плоскостей должны быть рассчитаны из условия $\frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{6\pi}{L} z\right) = 0$. Для случая $n = 7$ (нечётный случай)

нулевые плоскости получаются из похожих расчётов для $|f|^2 = \frac{2}{L} \cos^2\left(\frac{\pi n}{L} z\right)$.

Эти результаты продемонстрированы на рис. 27.

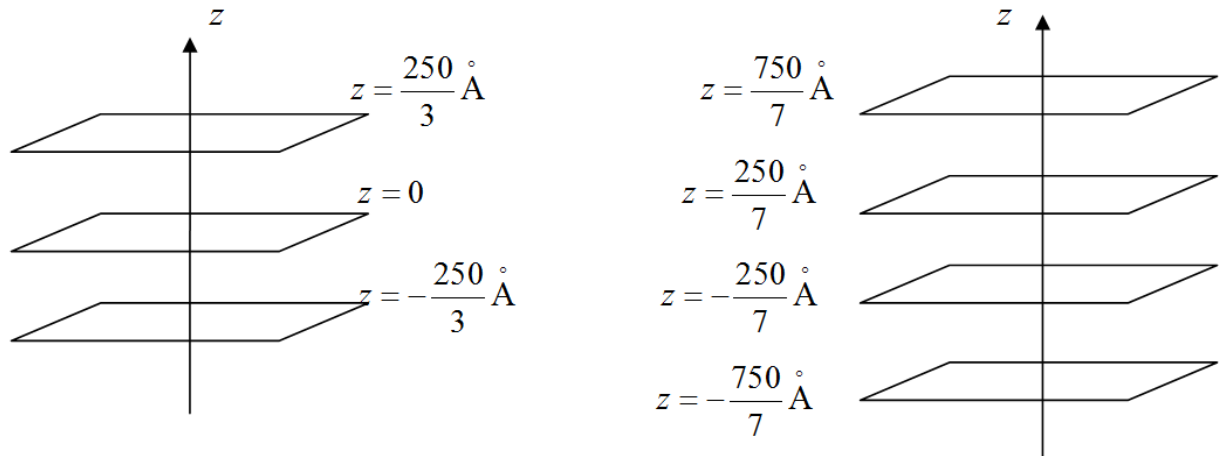


Рис. 27. Иллюстрация плоскостей, в которых полный ток равен нулю.

Как уже было сказано, при фиксированном значении m в выражении (3.16) можно выбрать вектор \vec{B} таким образом, что орбитальный ток будет равен нулю. Тогда вклад в плотность полного тока будет иметь только ток спинового магнитного момента:

$$\left(\vec{j}_{tot}\right)_\varphi = -2\mu_B^* c s_z |f|^2 \left\{ \frac{\partial |g|^2}{\partial \rho} \right\}, \quad (3.27)$$

который обусловлен градиентом радиального распределения электрона.

На рис. 28 и 29 изображены зависимости плотности, соответственно, тока спинового магнитного момента и полного тока от радиальной координаты. Как можно видеть из рис. 28, \vec{j}_{SMM} имеет немонотонный характер. Подобное поведение специфично для слоистой геометрии. Так как $\vec{\nabla}$, $\vec{\mu}_B^*$ и \vec{j}_{SMM} образуют правую ортогональную тройку, из (3.27) следует, что, когда $\vec{\nabla}|g|^2$ меняет своё направление на противоположное, \vec{j}_{SMM} должен также менять своё направление на противоположное (см. рис. 30).

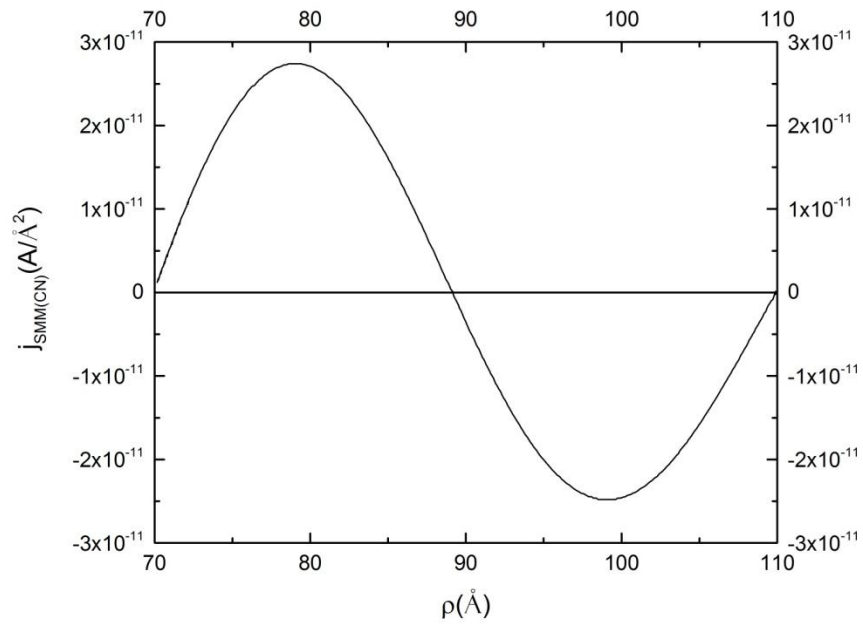


Рис. 28. Зависимость плотности тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для квантового цилиндрического нанослоя при $\vec{B} = 10^4 \text{Oe}$.

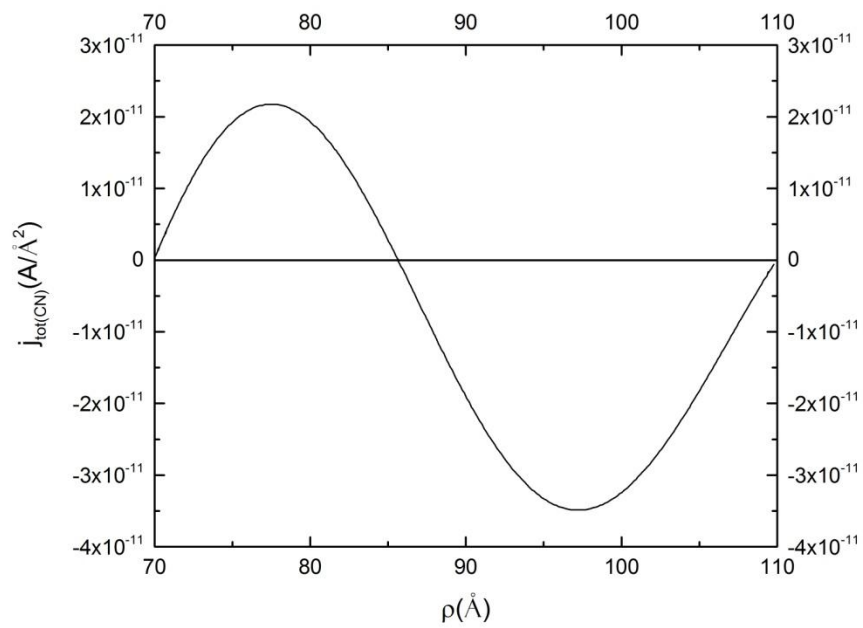


Рис. 29. Зависимость плотности полного тока от радиальной координаты для квантового цилиндрического нанослоя при $\vec{B} = 10^4 \text{Oe}$.

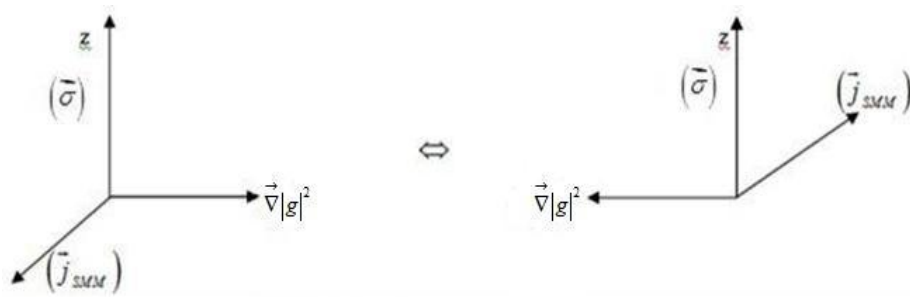


Рис. 30. Правая ортогональная тройка векторов.

На самом деле ток спинового магнитного момента есть псевдоток. Под током спинового магнитного момента нужно понимать воображаемый ток, который должен создавать то же самое распределение магнитного поля, которое создаётся спиновым магнитным моментом электрона. С физической точки зрения очевидно, что для цилиндрического нанослоя спиновый магнитный момент должен создавать магнитное поле, параллельное оси цилиндрического нанослоя, так как спин электрона изначально ориентирован по оси. Магнитное поле, параллельное оси Oz , может быть обусловлено противоположно направленными круговыми токами в плоскости, перпендикулярной оси Oz , что и иллюстрирует рис. 30.

§3.3. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в цилиндрической КТ

Обсудим случай цилиндрической КТ, то есть предельный случай, когда внутренний радиус цилиндрического нанослоя равен нулю. Все расчёты и логика те же, что и для цилиндрического нанослоя, с той разницей, что радиальная волновая функция имеет следующую форму [123]:

$$\psi(\rho) = C_3 \rho^{|m|} e^{-\frac{\rho^2}{4a_M^2}} {}_1F_1\left(-\left(\beta - \frac{|m|+1}{2}\right), |m|+1, \frac{\rho^2}{2a_M^2}\right), \quad (3.28)$$

где $\beta = \frac{E_\rho}{\hbar\omega_c} + \text{sign}(e)\frac{m}{2}$. Опять, используя условия нормировки, можно найти

постоянную интегрирования C_3 , а из граничного условия $\psi(\rho_0) = 0$

(ρ_0 – радиус цилиндра) можно найти энергетический спектр. Таким образом, имеем, что [123]:

$$\alpha_{n_\rho+1,|m|} = \beta - \frac{|m|+1}{2},$$

где $n_\rho = 0; 1; 2; \dots$ Следовательно:

$$E_{n_\rho, m} = \hbar \omega_c \left(\alpha_{n_\rho+1, m} - \text{sign}(e) \frac{m}{2} + \frac{|m|+1}{2} \right). \quad (3.29)$$

На рис. 31 изображено распределение плотности вероятности обнаружения электрона от радиальной координаты для случая цилиндрической КТ. Как видно из рисунка, в отличие от цилиндрического нанослоя, в случае КТ максимальная вероятность нахождения электрона приходится на центр КТ. На рис. 32 изображена зависимость орбитального тока от радиальной координаты. На периферии и в центре цилиндра ток равен нулю. На периферии он равен нулю, потому что волновая функция и, следовательно, вероятность нахождения там электрона равны нулю. В центре же системы ток равен нулю, потому что там нет “вращения” электрона. Поскольку мы обсуждаем случай $m=0$, то орбитальный ток отрицателен и его профиль имеет развёрнутую форму плотности вероятности радиального распределения. Поведение плотности тока спинового магнитного момента изображено на рис. 33. На рис. 34 проиллюстрирована зависимость полного тока от радиальной координаты.

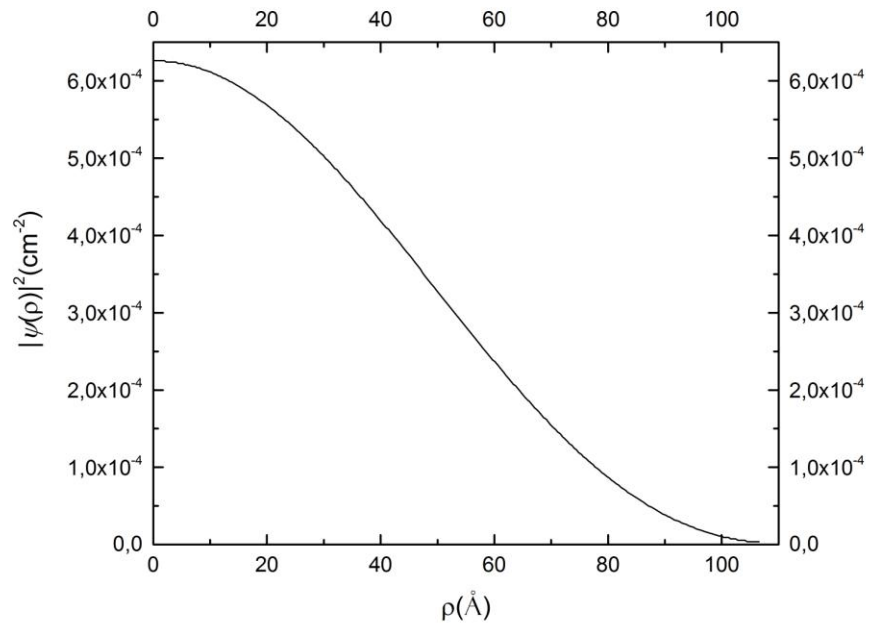


Рис. 31. Распределение плотности вероятности электрона для цилиндрической КТ при \vec{u}
 $B = 10^4 \text{ Oe}$.

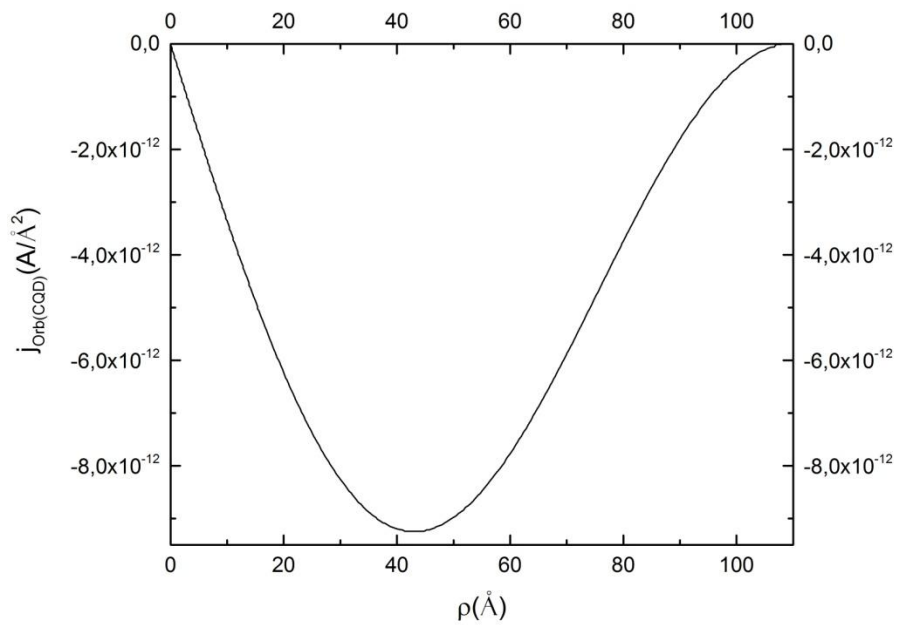


Рис. 32. Зависимость плотности орбитального тока от радиальной координаты для
цилиндрической КТ при \vec{u}
 $B = 10^4 \text{ Oe}$.

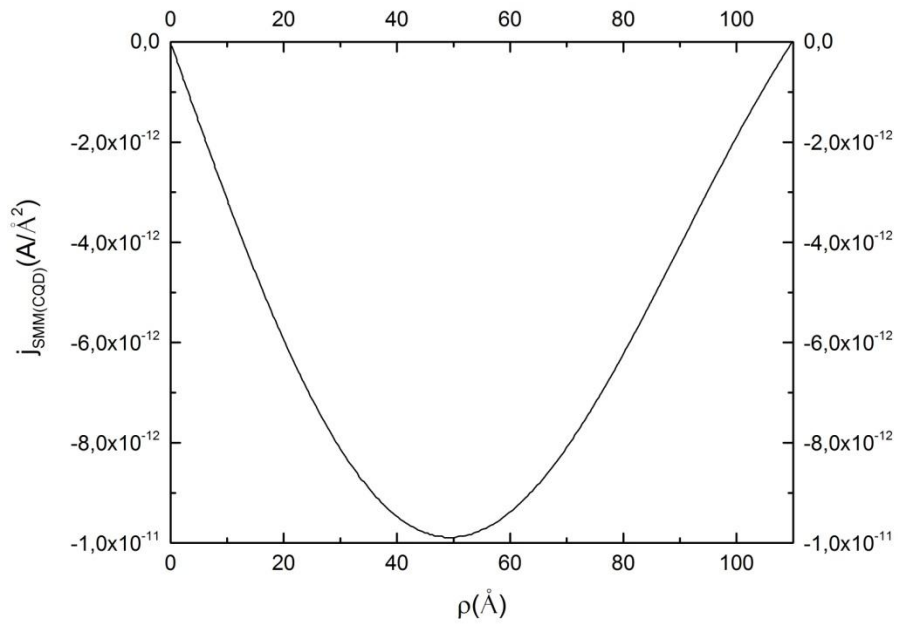


Рис. 33. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для цилиндрической КТ при $\vec{B} = 10^4 Oe$.

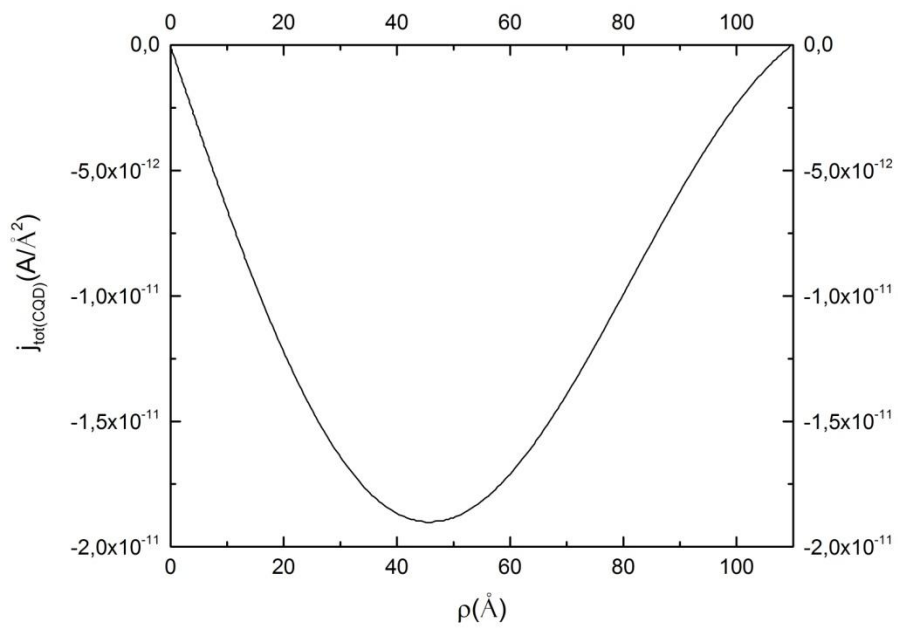


Рис. 34. Зависимость полного тока от радиальной координаты, когда $\vec{B} = 10^4 Oe$.

§3.4. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ электрона в цилиндрической КТ

В данном параграфе рассмотрим ток спинового магнитного момента, создаваемый электроном, локализованным в сферической КТ с непроницаемыми стенками. Как известно, в этом случае уравнение Шрёдингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_{conf}(R) \right\} \Psi_{n_r, l, m, s_z}(r, \theta, \varphi, s_z) = E_{n_r, l, m, s_z} \Psi_{n_r, l, m, s_z}(r, \theta, \varphi, s_z) \quad (3.30)$$

с потенциалом ограничения

$$V_{conf}(R) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R \end{cases} \quad (3.31)$$

(R – радиус КТ) допускает разделение переменных, и его решение можно записать в виде [72]:

$$\Psi_{n_r, l, m, s_z}(r, \theta, \varphi, s_z) = \frac{1}{r} \psi_{n_r, l}(r) Y_{l, m}(\theta, \varphi) \chi_{\pm s_z},$$

(3.32) где $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $Y_{l, m}(\theta, \varphi)$ – снова обозначены сферические

гармоники. При этом радиальная часть волновой функции $\psi_{n_r, l}(r)$ в интервале $0 \leq r \leq R$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{d^2}{dr^2} \psi_{n_r, l}(r) + \left(k_{n_r, l}^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \psi_{n_r, l}(r) = 0, \quad (3.33)$$

где $k_{n_r, l}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. При этом $\psi_{n_r, l}(R) = 0$. Решениями данного уравнения

являются так называемые сферические функции Бесселя, которые для интересующих нас двух наинизших уровней $n_r = 1$ и $l = 0$, $l = 1$ имеют вид [72]:

$$\begin{aligned}
j_0(z) &= \sin z, \\
j_1(z) &= \frac{\sin z}{z} - \cos z.
\end{aligned}
\tag{3.34}$$

Энергетический спектр для каждого l будет представлять собой бесконечное дискретное число значений:

$$\begin{aligned}
E_{1,0} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_{1,0}^2, \\
E_{1,1} &= \frac{\hbar^2}{2m} k_{1,1}^2,
\end{aligned}
\tag{3.35}$$

где $k_{1,0(1,1)}$ – корни соответствующих бesselевых функций.

Выражение для тока спинового магнитного момента, когда спин электрона направлен в вдоль оси z , то есть имеет значение $\hbar/2$, задаётся в вышеприведённом виде (3.2). Учитывая то, что мы рассматриваем случай $l=0$, выражение для $(j_{SMM})_{1s+}$ может быть приведено к виду [118]:

$$(j_{SMM})_{1s+}^{\mathbf{r}} = -\mu_B c \left[\mathbf{k} \times \nabla \rho(r) \right] = -e_\varphi \mu_B c \sin \theta \frac{d}{dr} \rho(r),
\tag{3.36}$$

где e_φ – базисный вектор координатной линии φ , возникающей при пересечении координатных поверхностей $r = \text{const}$ и $\theta = \text{const}$, θ – полярный угол между базисным вектором \mathbf{k} и направлением вдоль оси z , $\rho(r) = |\Psi|^2$ – функция плотности распределения заряда. Полная волновая функция для интересующего нас случая $l=0$ имеет вид:

$$F_{l=0}(k_{1,0}r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \frac{\sin k_{1,0}r}{r}.
\tag{3.37}$$

Так как далее нам придётся иметь дело с функцией $\rho(r)$, приведём на основе (3.37) зависимость этой функции от радиальной координаты сферической КТ. На рис. 35 приведена зависимость квадрата волновой функции (3.37) от расстояния до центра сферы. Из неё следует, что наивероятное

местонахождение частицы есть геометрический центр КТ. По мере приближения к границе КТ вероятность $\rho(r)$ монотонно убывает.

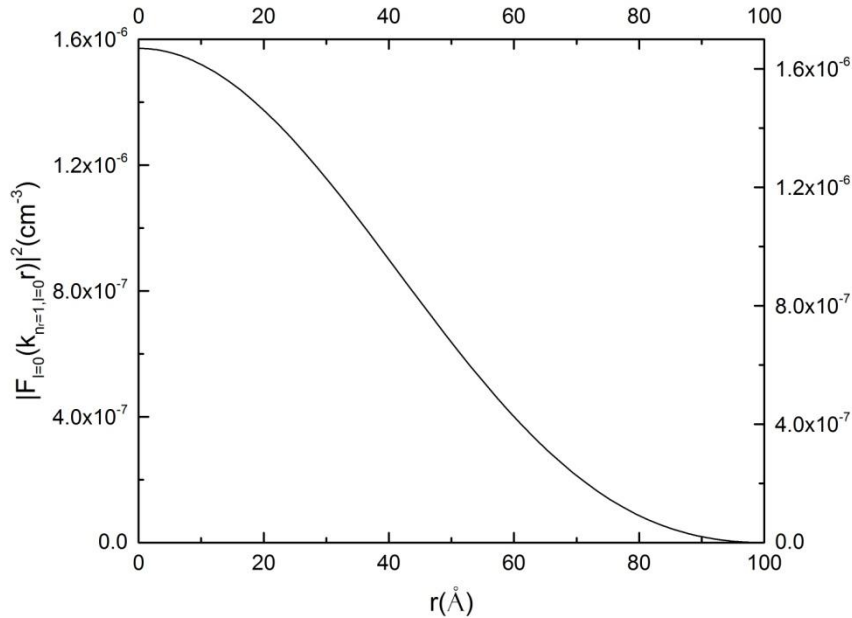


Рис. 35. Зависимость квадрата волновой функции от расстояния до центра сферы для состояния $1s +$.

На основе (3.37) из (3.36) после определённых расчётов для $\left(j_{SMM}^r\right)_{1s+}$ получается выражение:

$$\left(j_{SMM}^r\right)_{1s+} = e_{\varphi} \frac{m\mu_0 c}{2\pi R} \left(2 \frac{1}{r^3} \sin^2 k_{1,0} r - \frac{k_{1,0} \sin 2k_{1,0} r}{r^2}\right) \sin \theta. \quad (3.38)$$

Так как, $\left(j_{SMM}^r\right)_{1s+}$ определяется градиентом радиального распределения вероятностей $\rho(r)$, то искомая функция будет, соответственно, иметь немонотонный характер поведения, в зависимости от радиальной координаты r с максимумом в точке перегиба функции плотности распределения, как это показано на рис. 36.

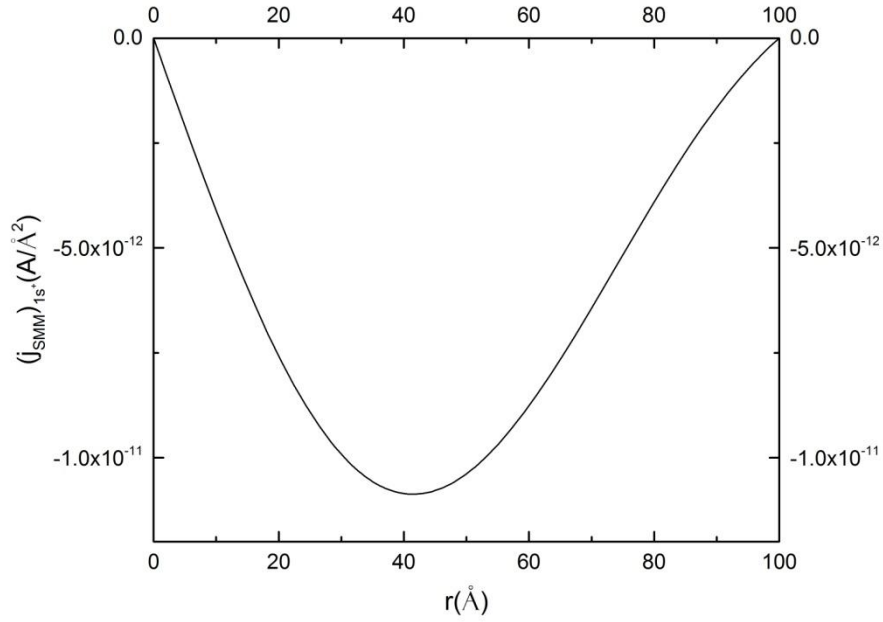


Рис. 36. Зависимость тока спинового магнитного момента от расстояния до центра сферы для состояния $1s^+$.

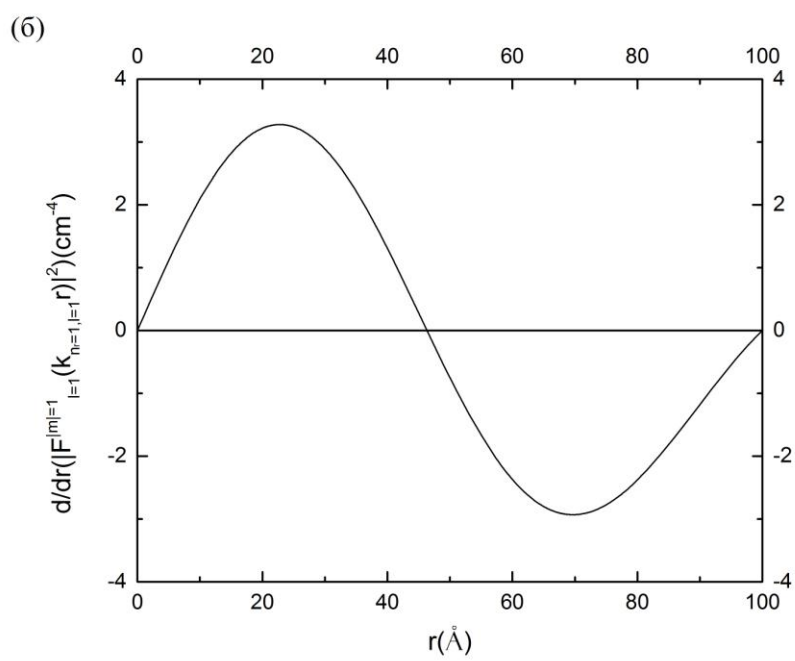
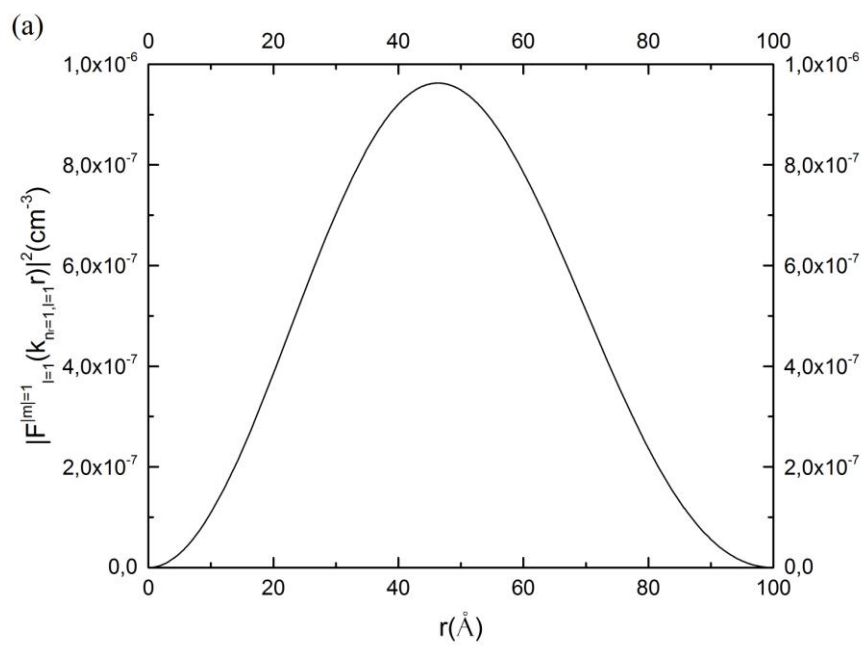
Теперь рассмотрим случай, когда $l = 1$, для которого волновые функции состояний $m = \pm 1$ и $m = 0$ согласно (3.34) задаются видом:

$$F_{l=1}^{m=\pm 1}(\theta, \varphi, k_{1,1}r) = C \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{\pm i\varphi} \sin \theta \frac{1}{r} \left(\frac{\sin k_{1,1}r}{k_{1,1}r} - \cos k_{1,1}r \right) (a),$$

$$F_{l=1}^{m=0}(\theta, \varphi, k_{1,1}r) = C' \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cos \theta \frac{1}{r} \left(\frac{\sin k_{1,1}r}{k_{1,1}r} - \cos k_{1,1}r \right) (б),$$
(3.39)

где $C = 0,6834477$, $C' = \sqrt{2}C$ для $n_r = 1$.

Как видно из рис. 37(а), зависимость функции распределения плотности заряда от радиальной координаты имеет несимметричный вид, и максимального значения функция достигает при $r = 46 \text{ \AA}$, что очевидно также из рис. 37(б), где представлена зависимость производной квадрата волновой функции от радиальной координаты при фиксированном значении $\theta = \frac{\pi}{2}$. Зависимость же $\rho(\theta)$, как это видно из рис. 37(в), полностью симметрична.



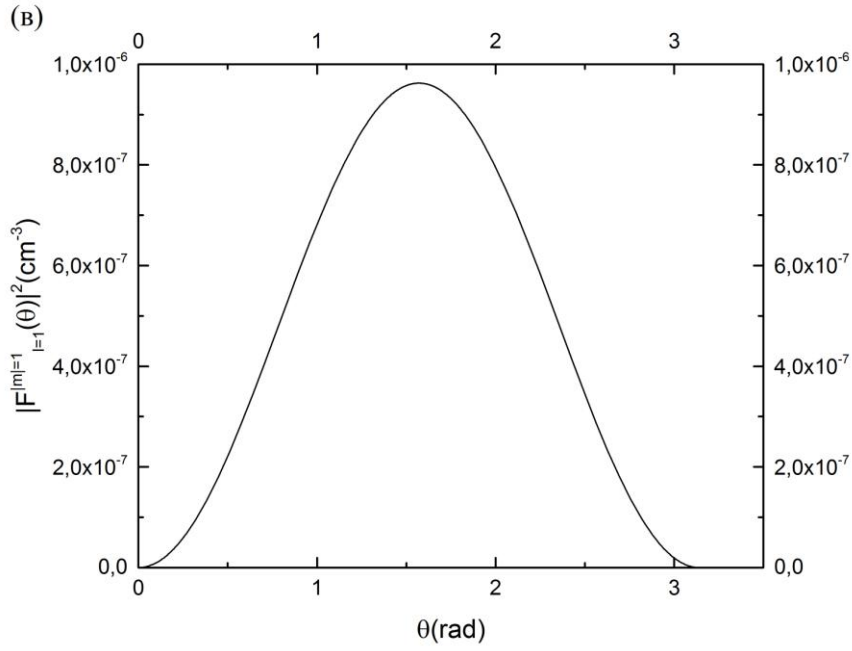


Рис. 37. Зависимость для случая $l=1$, $|m|=1$, (а) $\rho(r)$ для $\theta = \frac{\pi}{2}$, (б) $\frac{\partial \rho(r)}{\partial r}$ для

$\theta = \frac{\pi}{2}$, (в) $\rho(\theta)$ для $r = 46 \text{ \AA}$.

При расчёте тока спинового магнитного момента для случаев $m=0$ и $m=\pm 1$ при $l=1$ будем исходить из следующих соображений. В обоих случаях, с учётом того что вектор $\nabla \rho(r)$ в (3.36) имеет две отличные от нуля

компоненты (в отличие от случая $l=0$) $\left[\nabla \rho(r, \theta) \right]_r = \frac{\partial}{\partial r} \rho(r, \theta) e_r$ и

$\left[\nabla \rho(r, \theta) \right]_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(r, \theta) e_\theta$, выражение (3.36) для данного частного случая

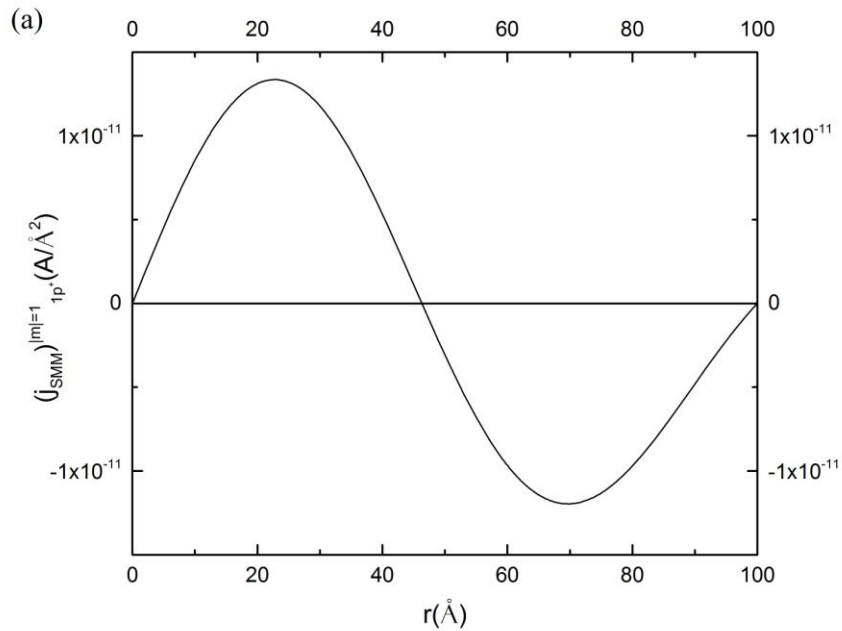
примет вид:

$$\left(j_{SMM} \right)_{1p+}^r = -e_\varphi \mu_0 c \left(\sin \theta \frac{d}{dr} \rho(r, \theta) + \cos \theta \frac{1}{r} \frac{d}{d\theta} \rho(r, \theta) \right). \quad (3.40)$$

Следовательно, после подстановки (3.39(а)) в (3.40) для $m = \pm 1$ будем иметь:

$$\begin{aligned} \left(j_{SMM}^r \right)_{1p+}^{|m|=1} = & -e_{\varphi} C^2 \frac{3\mu_0 c}{8\pi} \left[\left(\frac{4\sin 2k_{1,1}r}{k_{1,1}r^4} - 4\frac{\sin^2 k_{1,1}r}{k_{1,1}r^5} - \frac{2\cos 2k_{1,1}r}{r^3} - \frac{2\sin 2k_{1,1}r}{k_{1,1}r^3} - \frac{2\cos^2 k_{1,1}r}{r^3} - \frac{k_{1,1}\sin 2k_{1,1}r}{r^2} \right) \sin^3 \theta + \right. \\ & \left. + \left(\frac{\sin^2 k_{1,1}r}{k_{1,1}r^5} - \frac{\sin 2k_{1,1}r}{k_{1,1}r^4} + \frac{\cos^2 k_{1,1}r}{r^3} \right) \cos \theta \sin 2\theta \right] \end{aligned} \quad (3.41)$$

Как следует из рис. 38 ((а), (б)) положительная и отрицательная компоненты тока спинового магнитного момента ведут себя неодинаково при изменении зенитного угла θ . Так, при $\theta = \frac{\pi}{2}$ (рис. 38(а)) максимальные значения положительной и отрицательной компонент неодинаковы по величине. Положительная компонента имеет большее значение по модулю, нежели отрицательная. При значении же $\theta = \frac{\pi}{8}$ (рис. 38(б)) отрицательная компонента практически отсутствует, в то время как положительная ещё сохраняет значение, существенно отличное от нуля.



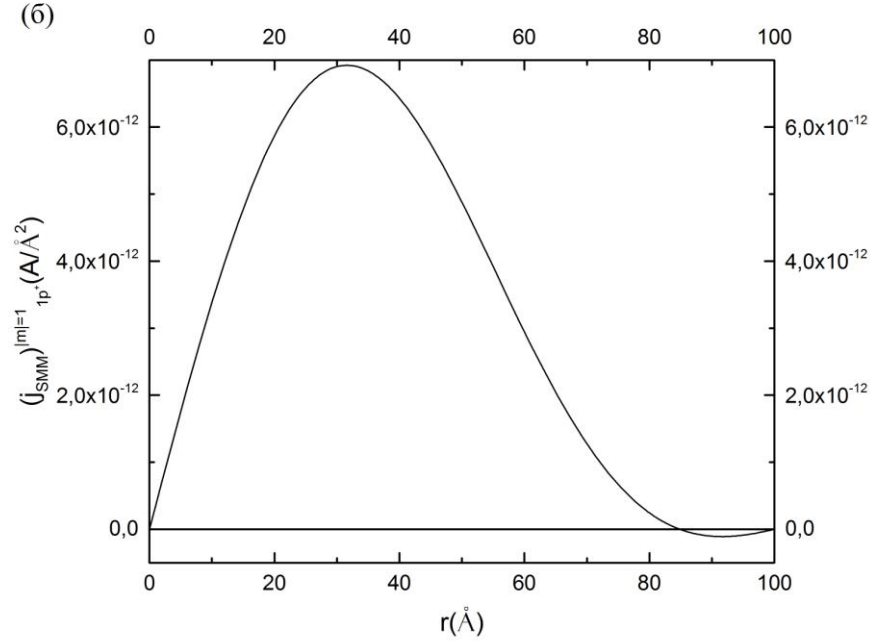


Рис. 38. Зависимость тока спинового магнитного момента при $l=1$, $|m|=1$ (а) от расстояния до центра сферы при фиксированном значении $\theta = \frac{\pi}{2}$, (б) то же при $\theta = \frac{\pi}{8}$.

Для случая $m=0$ все расчёты, связанные с током спинового магнитного момента, производятся аналогичным образом с использованием второй функции в (3.41), в результате чего имеем:

$$\begin{aligned}
 \left(j_{SMM} \right)_{1p^+}^{m=0} = & -e_{\varphi} C^{1/2} \frac{3\mu_0 c}{8\pi} \left[\left(\frac{4 \sin 2k_{n,l} r}{k_{n,l} r^4} - 4 \frac{\sin^2 k_{n,l} r}{k_{n,l}^2 r^5} - \frac{2 \cos 2k_{n,l} r}{r^3} - \frac{2 \sin 2k_{n,l} r}{k_{n,l} r^3} - \frac{2 \cos^2 k_{n,l} r}{r^3} - \frac{k_{n,l} \sin 2k_{n,l} r}{r^2} \right) \sin \theta \cos^2 \theta - \right. \\
 & \left. - \left(\frac{\sin^2 k_{n,l} r}{k_{n,l}^2 r^5} - \frac{\sin 2k_{n,l} r}{k_{n,l} r^4} + \frac{\cos^2 k_{n,l} r}{r^3} \right) \cos \theta \sin 2\theta \right]
 \end{aligned}
 \tag{3.42}$$

§3.5. Незатухающий орбитальный ток и ток СММ примесного электрона в сферической КТ

Рассмотрим теперь характер тока спинового магнитного момента электрона, когда в центре КТ находится примесь. В этом случае гамильтониан системы будет иметь вид:

$$\mathbf{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{\varepsilon r} + V_{conf}(r) \right], \quad (3.43)$$

где для ограничивающего потенциал КТ (**GaAs**) $V_{conf}(r)$ снова имеем

$$V_{conf}(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R \end{cases}, \quad (3.44)$$

где R – радиус КТ, $\varepsilon = 12,91$ – диэлектрическая проницаемость КТ, Z – заряд примеси.

Уравнение (3.43) с ограничивающим потенциалом (3.44) было рассмотрено в [81], где подчёркивалось, что в зависимости от значения радиуса КТ полная энергия системы может быть как больше нуля, так и меньше, а также равна нулю ($E > 0$, $E < 0$, $E = 0$). В сферических координатах решение уравнения (3.43) в общем случае имеет вид:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (3.45)$$

где $\psi(r)$ – радиальная волновая функция.

Для области с отрицательной энергией $E < 0$ радиальная функция имеет вид [81]:

$$\psi(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{|l|} {}_1F_1(|l|+1-\lambda, 2|l|+2, \xi), \quad (3.46)$$

где $\xi = \alpha r$, $\alpha^2 = -\frac{8\mu E}{\hbar^2} > 0$, ${}_1F_1(|l|+1-\lambda, 2|l|+2, \xi)$ – вырожденная гипергеометрическая функция. Энергетический спектр для этой области находится из стандартного условия равенства нулю радиальной части волновой функции $f(\xi = \alpha a) = 0$ на границе КТ, что равносильно равенству нулю в точке a вырожденной гипергеометрической функции:

$${}_1F_1(|l|+1-\lambda, 2|l|+2, \xi = \alpha R) = 0. \quad (3.47)$$

Исходя из этих условий, для энергетического спектра E получается [81]:

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2 \lambda^2}, \quad (3.48)$$

где $\lambda = \frac{2\mu Ze^2}{\epsilon \hbar^2 \alpha}$ – аналог главного квантового числа. На рис. 39 кривые (а), (б)

и (в) характеризуют зависимость функции распределения плотности вероятности нахождения электрона в объёме от радиальной координаты для КТ с различными радиусами, выраженными в эффективных радиусах Бора $a_B = 104 \text{ \AA}$ ($R = 6a_B$, $R = 4a_B$, $R = 2a_B$). Как видно из рисунка, функции распределения плотности вероятности в случаях (а) и (б) ведут себя практически одинаково, что свидетельствует о том, что в КТ с большими радиусами электрон не чувствует влияния стенок и ведёт себя подобно электрону в поле водородоподобной примеси в массивном образце. Следует также отметить, что при больших значениях радиусов квадрат радиальной части волновой функции убывает менее резко в зависимости от радиальной координаты, чем для малых радиусов (рис. 39(в)), что также закономерно, так как при малых радиусах влияние стенок является сильным и ярко проявляет себя локализация электрона.

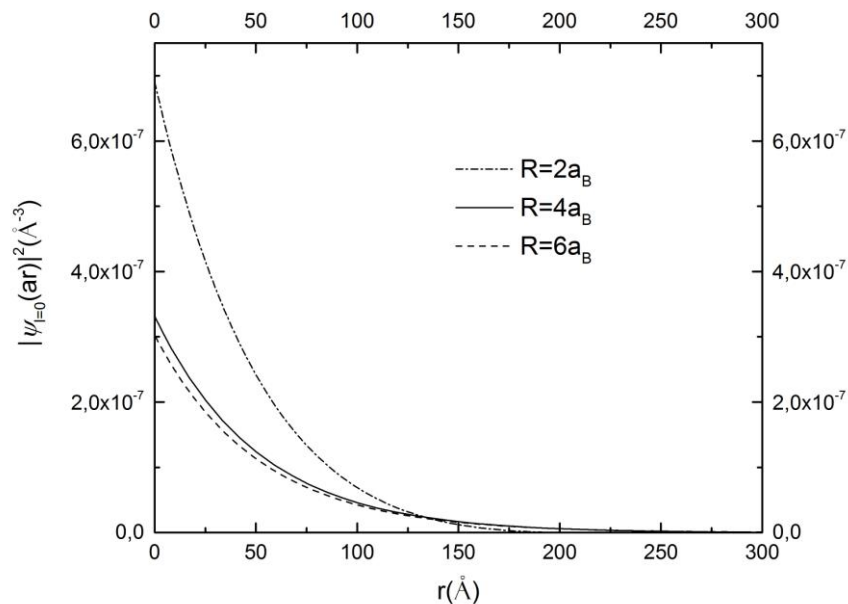


Рис. 39. Радиальное распределение плотности вероятности нахождения электрона в сферической КТ с водородоподобной примесью в центре для состояния $l = 0$ при (а) $R = 2a_B$, (б) $R = 4a_B$, (в) $R = 6a_B$.

Для области положительных энергий $E > 0$ волновая функция $f(\xi)$ даётся соотношением [81]:

$$\psi(\xi) = e^{-i\xi} \xi^l {}_1F_1(l+1-i\eta, 2l+2, 2i\xi), \quad (3.49)$$

где $\alpha^2 = -\frac{8\mu E}{\hbar^2} < 0$, $\eta = \sqrt{\frac{\mu Z^2 e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{E}}$. Для нахождения энергетического спектра должно быть удовлетворено граничное условие:

$${}_1F_1(l+1-i\eta, 2l+2, 2i\xi) = 0, \quad (3.50)$$

откуда следует, что:

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} \frac{1}{\eta^2}. \quad (3.51)$$

Зависимости функции плотности распределения вероятности в случае положительных энергий для КТ с различными радиусами характеризуются, соответственно, кривыми (а), (б) и (в) ($R = a_B$, $R = 1.4a_B$, $R = 1.8a_B$ соответственно) рис. 40, откуда видно, что, как и в предыдущем случае (см. рис. 39), здесь также скорость убывания кривой (в) по сравнению с кривыми (а) и (б) проявляется сильнее.

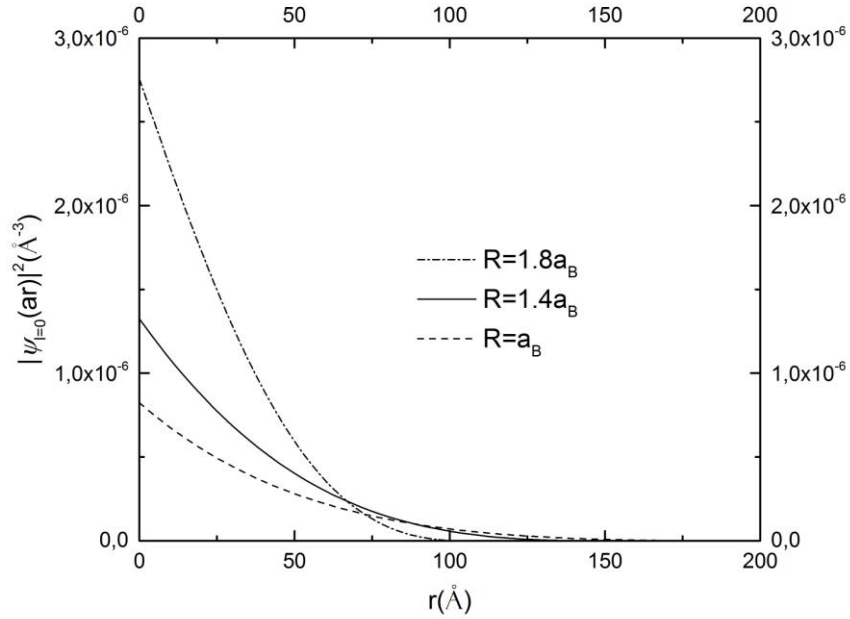


Рис. 40. Радиальное распределение плотности вероятности электрона в сферической КТ с водородоподобной примесью в центре для состояния $l = 0$ при (а) $R = 1.8a_B$, (б) $R = 1.4a_B$, (в) $R = a_B$.

Для нахождения того значения радиуса КТ, при котором энергия равна нулю, необходимо в уравнение Шрёдингера подставить значение $E = 0$, после чего оно примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2d}{rdr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi(r) - \frac{Ze^2}{\epsilon r} \psi(r) = 0, \quad (3.52)$$

решением которого является функция [81]:

$$\psi_0(r) = r^{1/2} J_1 \left[\left(\frac{8\mu Ze^2}{\epsilon \hbar^2} \right)^{1/2} r^{1/2} \right], \quad (3.53)$$

где $J_1 \left[\left(\frac{8\mu Ze^2}{\epsilon \hbar^2} \right)^{1/2} r^{1/2} \right]$ – функция Бесселя. Значение радиуса, при котором

происходит обнуление энергии, находится из граничного условия $\psi_0(R_0) = 0$, для обеспечения которого необходимо потребовать, чтобы

$$\left(\frac{8\mu Ze^2}{\epsilon h^2}\right)R_0 = x_i^2, \quad (3.54)$$

где x_i – корни функции Бесселя. Численные расчёты показывают, что $R_0 = 1,8325a_B$.

Зависимость квадрата модуля функции (3.53) от радиальной переменной изображена на рис. 41.

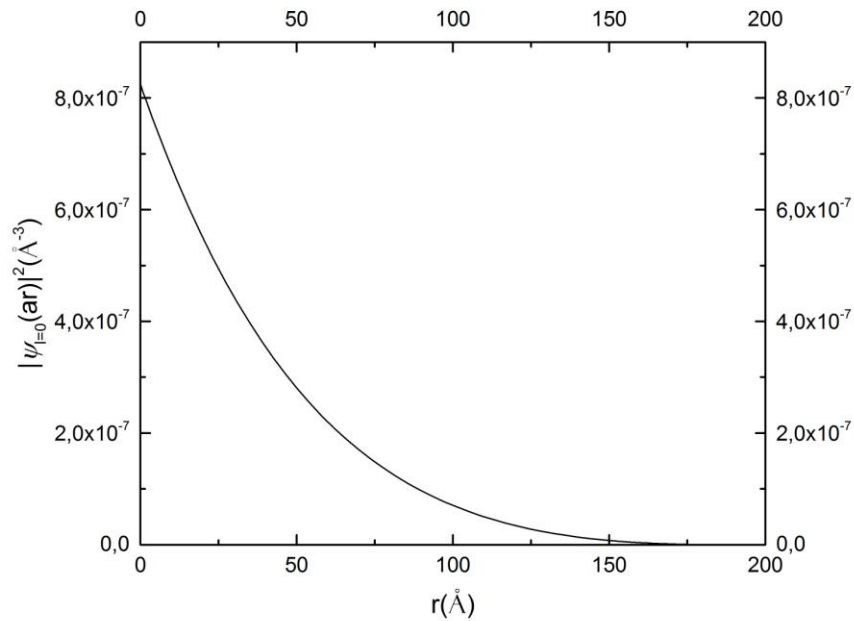


Рис. 41. Радиальное распределение плотности вероятности электрона в сферической КТ с водородоподобной примесью в центре для состояния $l = 0$ при $R = 1,8325a_B$.

Таким образом, при больших радиусах КТ энергия электрона принимает только отрицательные значения, а при радиусах меньших, чем $1,8325a_B$, – положительные. С физической точки зрения это объясняется тем, что при больших радиусах размерное квантование ослабевает и влияние стенок на электрон становится слабее кулоновского влияния примесного центра, что приводит к тому, что спектр энергии электрона становится отрицательным, аналогично задаче атома водорода. В случае же малых радиусов взаимодействие электрона со стенками является доминирующим по

сравнению с кулоновским взаимодействием электрона с примесью (размерное квантование становится значительно сильнее кулоновского), вследствие чего спектр энергии становится положительным, аналогично случаю с электроном в сферической КТ без примеси. Естественно, что существует некоторое значение радиуса R_0 , при котором эти два взаимодействия полностью уравнивают друг друга, обнуляя энергию электрона.

Перейдём к расчёту тока спинового магнитного момента в рамках рассматриваемой задачи. В приближении Рассела – Саундерса волновая функция электрона с учётом спина будет иметь вид:

$$\Psi\left(r, \sigma\right) = \psi\left(r\right) \chi_s. \quad (3.55)$$

Как следует из сказанного ранее, при отсутствии магнитного поля для s-состояния электрона ($l = 0, m = 0$) орбитальный ток равен нулю, а для тока спинового магнитного момента получается следующее соотношение:

$$\left(j_{SMM}^r\right)_{s=\hbar/2} = -e_\phi \mu_B^* c \sin \theta \frac{d}{dr} \psi^2(r). \quad (3.56)$$

На рис. 42 представлены зависимости $\left(j_{SMM}^r\right)_{s=\hbar/2}(r)$ для s-состояния при

$\theta = \frac{\pi}{2}$, $R = 2a_B$, $R = 4a_B$, $R = 6a_B$, когда $E > 0$. Из этих графиков следует, что

по модулю наибольшее значение для j_{SMM}^r соответствует случаю наименьшего радиуса КТ $a = 2a_B$, когда локализация примесного электрона наибольшая и поэтому зависимость $\psi^2(r)$ является быстро меняющейся (рис. 39). Подстановкой в выражение (3.56) волновых функций (3.46), (3.49) и (3.53) можно получить выражения для токов спинового магнитного момента, соответственно, для областей с отрицательной, положительной и нулевой энергиями, графики зависимости которых от радиальной координаты при различных радиусах КТ показаны на рис. 42–44.

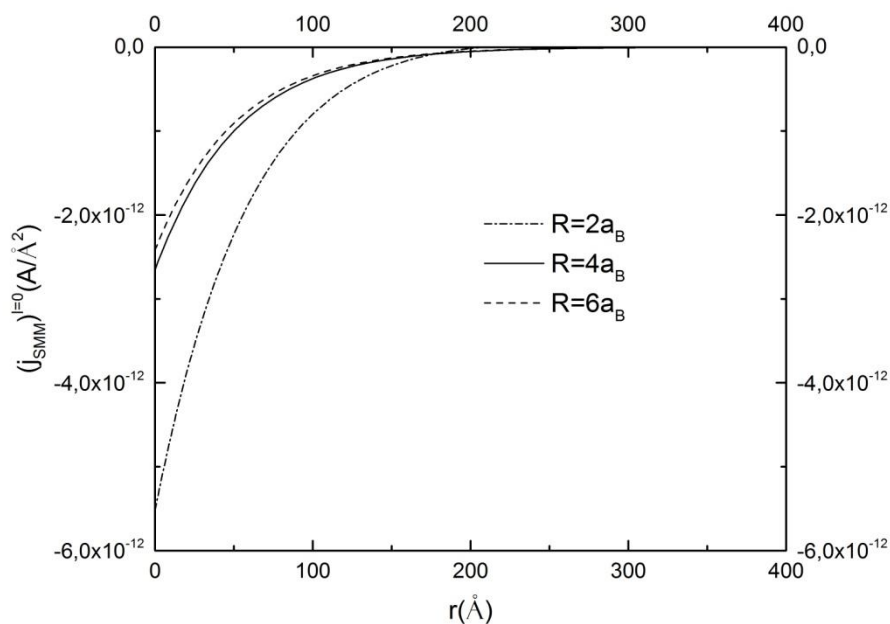


Рис. 42. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для состояния $l = 0$ при $\theta = \frac{\pi}{2}$, (а) $R = 2a_B$, (б) $R = 4a_B$, (в) $R = 6a_B$.

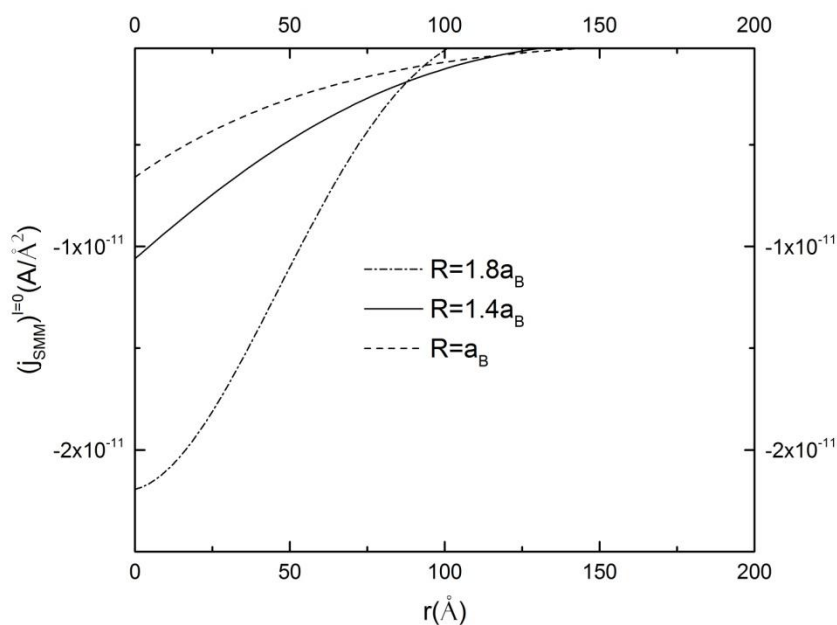


Рис. 43. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для состояния $l = 0$ при $\theta = \frac{\pi}{2}$, (а) $R = 1.8a_B$, (б) $R = 1.4a_B$, (в) $R = a_B$.

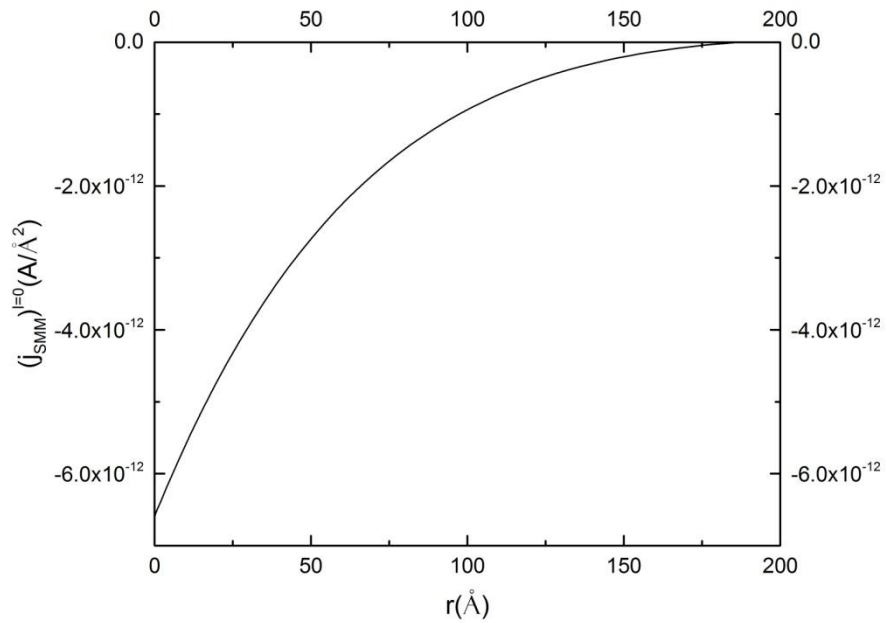


Рис. 44. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты

для состояния $l = 0$ при $\theta = \frac{\pi}{2}$, $R = 1,8325a_B$.

На рис. 45 для сравнения представлены кривые зависимости тока спинового магнитного момента от радиальной координаты при фиксированном радиусе для различных значений угла θ . Из рисунка следует, что с ростом радиальной переменной разница в углах становится менее существенной.

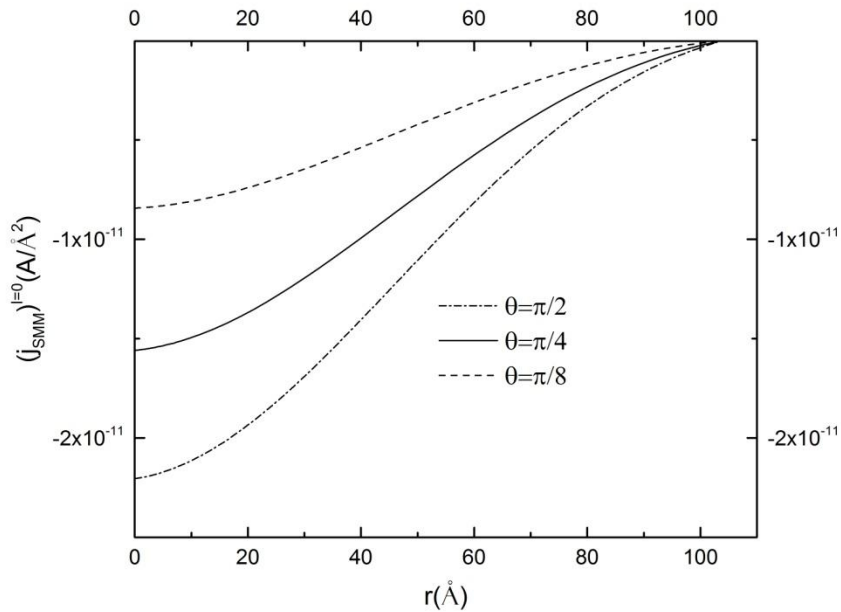


Рис. 45. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для состояния $l = 0$ при $a = a_B$ (а) $\theta = \frac{\pi}{2}$, (б) $\theta = \frac{\pi}{4}$, (в) $\theta = \frac{\pi}{8}$.

Особый интерес представляет сравнение зависимостей токов спинового магнитного момента электрона, находящегося в сферической КТ, при наличии в ней примеси и без неё (данный случай обсуждался в предыдущем параграфе). Из рис. 46, наглядно иллюстрирующем это сравнение, видно, что при одинаковом радиусе КТ ($R = a_B$) максимальное значение тока в случае наличия примеси почти в 2,5 раза больше, чем для КТ без примесного центра. Градиент радиальной волновой функции проявляет себя ярче, так как локализация электрона обусловлена как кулоновским центром, так и стенками КТ. Кроме того, примечательно также принципиально различное поведение кривых – монотонное в случае КТ с примесью в центре и немонотонное в случае её отсутствия. Немонотонность кривой (а) является следствием наличия точки перегиба у кривой (рис. 35), описывающей зависимость квадрата волновой функции от радиальной координаты, чего не наблюдается в случае КТ, содержащей примесь.

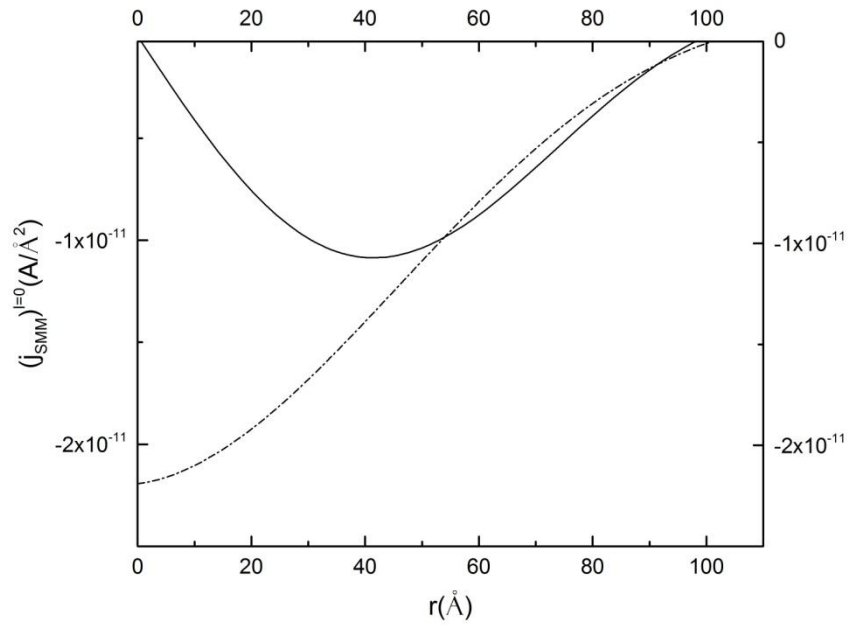


Рис. 46. Зависимость тока спинового магнитного момента от радиальной координаты для состояния $l=0$ при $a = a_B$, $\theta = \frac{\pi}{2}$ (а) при отсутствии примесного центра (сплошная кривая), (б) при его наличии (штрихпунктирная кривая).

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Для узкозонных цилиндрического и сферического нанослоёв из *InSb*, с учётом кейновского закона дисперсии носителей заряда, вычислены дипольные и квадрупольные поправки к значениям поля создаваемого электроном, локализованным в указанных системах. Показано, что дипольные поправки в обоих случаях равны нулю. Получены выражения для квадрупольных поправок. Даны условия, при которых эти поправки имеют положительный знак, когда конфигурация электронной оболочки имеет вид вытянутого сфероида, а также отрицательный – когда конфигурация электронной оболочки соответствует сплюснутому сфероиду. Для указанных случаев вычислены потенциалы, а также напряженности электрических полей на больших расстояниях от нанослоев.

2. Получены аналитические выражения для диамагнитной восприимчивости примесного электрона χ_{dia} в $Ga_{1-x_1}Al_{x_1}As/GaAs/Ga_{1-x_2}Al_{x_2}As$ core/shell/shell структуре с кратцеоровским потенциалом ограничения, когда примесь локализована в центре наноструктуры. Показано, что при уменьшении параметра потенциала r_0 , существует пороговое значение этого параметра, начиная с которого диамагнитная восприимчивость резко возрастает, что является следствием квантового выброса примесного электрона из нанослоя во внешнюю среду. Зависимость диамагнитной восприимчивости от высоты потенциала U_0 показывает уменьшение χ_{dia} с ростом U_0 .

3. Исследованы орбитальный ток и ток спинового магнитного момента электрона в цилиндрическом нанослое. Выявлены условия при которых основной вклад в полный ток обусловлен исключительно током спинового магнитного момента. В частности, определены радиусы “вращения” электрона при которых орбитальный ток становится равным нулю. Показано, что ток спинового магнитного момента имеет

немонотонный и знакопеременный характер в зависимости от радиальной координаты.

4. Получены зависимости токов спинового магнитного момента примесного электрона в сферической КТ от радиальной координаты при различных радиусах КТ. Показано, что при больших радиусах (область отрицательной энергии электрона) эта зависимость с увеличением радиуса практически не меняется, приобретая характер, присущий зависимости тока спинового магнитного момента электрона в водородоподобном атоме, что свидетельствует об ослаблении эффекта размерного квантования. При малых радиусах КТ (область положительной энергии), наоборот, влияние стенок преобладает над кулоновским влиянием со стороны примеси, что в свою очередь приводит к более ярко выраженной зависимости тока спинового магнитного момента электрона от радиальной координаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Chakraborty. *Quantum Dots: A survey of the properties of artificial atoms*. Elsevier, 1999.
2. D. Bimberg, M. Grundmann and N. N. Ledentsov. *Quantum dot heterostructures*. John Wiley & Sons, 1999.
3. Է. Մ. Ղազարյան, Ս. Գ. Պետրոսյան: *Կիսահաղորդչային նանոէլեկտրոնիկայի ֆիզիկական հիմունքները*: ՌՀՀ Հրատարակչություն, 2005.
4. Z. I. Alferov The history and future of semiconductor heterostructures. *Semiconductors*. Volume 32, Issue 1, pp. 1–14, 1998.
5. Al. L. Efros and A.L. Efros. Interband absorption of light in a semiconductor sphere. *Sov. Phys. Semicond*, Volume 16, Issue 772, 1982.
6. V. Holovatsky, O. Voitsekhivska and I. Bernik Oscillator strengths of quantum transitions in spherical quantum dot GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As with on-center donor impurity. *Acta Phys. Pol. A*, Volume 125, Issue 1, pp. 93–97, 2014.
7. M. S. Kushwaha. Magneto-optical absorption in semiconducting spherical quantum dots: Influence of the dot-size, confining potential, and magnetic field. *AIP Advances*, Volume 4, Issue 12, 2014.
8. S. Yu. Kruchinin, I. D. Rukhlenko, A. S. Baimuratov, M. Yu. Leonov, V. K. Turkov, Y. K. Gun'ko, A. V. Baranov and A. V. Fedorov. Photoluminescence of a quantum-dot molecule. *Journal of Applied Physics*, Volume 117, Issue 1, 2015.
9. M. A. Semina, A. A. Golovatenko and A. V. Rodina. Ground state of the holes localized in II-VI quantum dots with Gaussian potential profiles. *Physical Review B*, Volume 93, Issue 4, 2016.
10. M. S. Kushwaha. Novel size effects on magneto-optics in the spherical quantum dots. *Eprint arXiv:1604.03477*, 2016.

11. E. Aksahin, V. Ustoglu and M. Tomak. Exciton related optical absorption in a spherical quantum dot. *European Physical Journal B*, Volume 87, 2014.
12. A. Gueddim, T. Eloud, N. Messikine and N. Bouarissa. Energy levels and optical properties of GaN spherical quantum dots. *Superlattices and Microstructures*, Volume 77, pp. 124–133, 2015.
13. B. Qakir, Y. Yakar and A. Ozmen. Linear and nonlinear optical absorption coefficients of two-electron spherical quantum dot with parabolic potential. *Physica B: Condensed Matter*, Volume 458, pp. 138–143, 2015.
14. S. LeGoff and B. Stebe. Binding energy of excitons in cylindrical quantum dots. *Solid State Commun.*, Volume 83, Issue 555, 1992.
15. S. Le Goff and B. Stebe. Influence of longitudinal and lateral confinements on excitons in cylindrical quantum dots of semiconductors. *Physical Review B*, Volume 47, 1993.
16. J. D. Castaño-Yepes, C. F. Ramirez-Gutierrez and A. Gómez Edgar. Heat capacity, magnetization and magnetic susceptibility for a GaAs quantum dot with asymmetric confinement: a comparative result. *Eprint arXiv:1609.01359*, 2016.
17. V. Moldoveanu, I. V. Dinu, R. Dragomir and B. Tanatar. Light-hole exciton mixing and dynamics in Mn-doped quantum dots. *Physical Review B*, Volume 93, Issue 16, 2016.
18. I. Janus-Zygmunt, B. Kędzierska, A. Gorczyca-Goraj, E. Zipper and M. Mańska Maciej. Quantum dot-ring nanostructure – A comparison of different approaches. *Int. J. Mod. Phys. B*, Volume 30, Issue 13, 2013.
19. R. B. Stinchcombe, S. L. A. de Queiroz, M. A. G. Cunha and B. Koiller. Dynamics of driven flow with exclusion in graphene-like structures. *Physical Review E*, Volume 88, Issue 4, 2013.
20. V. I. Boichuk, I. V. Bilynskyi, O. A. Sokolnyk and I. O. Shakleina. Effect of quantum dot shape of the GaAs/AlAs heterostructure on interlevel hole light absorption. *Condensed Matter Physics*, Volume 16, Issue 3, 2013.

21. A. G. Intronati, P. I. Tamborenea, D. Weinmann and A. R. Jalabert. Spin-orbit effects in nanowire-based wurtzite semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, Volume 88, Issue 4, 2013.
22. A. Özmen, B. Çakır and Y. Yakar. Electronic structure and relativistic terms of one-electron spherical quantum dot. *J. Luminesc.* Volume 137, pp. 259–268, 2013.
23. G. H. Safarpour and M. Barati. The optical absorption coefficient and refractive index changes of aspherical quantum dot placed at the center of a cylindrical nano-wire. *J. Luminesc.*, Volume 137, pp. 98–104, 2013.
24. T. Chen, W. Xie and S. H. Liang. Optical and electronic properties of a two-dimensional quantum dot with an impurity. *J. Luminesc.* Volume 139, pp. 64–68, 2013.
25. G. H. Safarpour, M. Barati and M. Moradi. Hydrostatic pressure and temperature effects on the electronic energy levels of a spherical quantum dot placed at the center of a nano-wire. *Superlattices and Microstructures*, Volume 52, 2012.
26. A. Antonov, V. Daniltsev, M. Drozdov, Yu. Drozdov, L. Moldavskaya and V. Shashkin. Intraband Photoconductivity Induced by Interband Illumination in InAs/GaAs Heterostructures with Quantum Dots. *Semiconductors*, Volume 46, No. 11, pp. 1415–1417, 2012.
27. A. Soylu. The influence of external fields on the energy of two interacting electrons in a quantum dot. *Ann. Phys.*, Volume 327, Issue 12, 2012.
28. Y. Zhang, X. Han, J. Zhang, Y. Liu, H. Huang, H. Ming, Sh. Lee and Zh. Kang. *Nanoscale*, Volume 4, 2012.
29. J. Munarriz, F. Domínguez-Adame, P. Orellana and A. Malyshev. Graphene nanoring as a tunable source of polarized electrons. *Nanotechnology*, Volume 23, Issue 20, 2012.
30. S. W. Kim, J. P. Zimmer, S. Ohnishi, J. B. Tracy, J. V. Frangioni and M. G. Bawendi. Engineering InAs_xP_{1-x}/InP/ZnSe III-V alloyed core/shell quantum dots for the near-infrared. *J. Am. Chem. Soc.*, Volume 127, Issue 30, 2009.

31. Y. Yao, J. Yao, V. K. Narasimhan, Z. Ruan, Ch. Xie, Sh. Fan and Yi Cui. Broadband light management using low-Q whispering gallery modes in spherical nanoshells. *Nature Communications*, Volume 3, 2012.
32. S. Kim, B. Fisher, H. J. Eisler and M. Bawendi. Type-II quantum dots: CdTe/CdSe (core/shell) and CdSe/ZnTe (core/shell) Heterostructures. *J. Am. Chem. Soc.*, Volume 125, Issue 38, 2003.
33. S. Kim, J. Park, T. Kim, E. Jang, S. Jun, H. Jang, B. Kim and S. W. Kim. Reverse type-I ZnSe/InP/ZnS core/shell/shell nanocrystals: cadmium-free quantum dots for visible luminescence. *Small*, Volume 7, Issue 1, pp. 70–73, 2011.
34. A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia and P. M. Petroff. Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Physical Review Letters*, Volume 84, 2000.
35. T. Chakraborty and P. Pietiläinen. Interacting-electron states and the persistent current in a quantum ring. *Solid State Commun.*, Volume 87, pp. 809–812, 1993.
36. E. M. Kazaryan, A. A. Kostanyan and H.A. Sarkisyan. Interband transitions in a spherical quantum layer in the presence of an electric field: Spherical rotator model. *Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)*, Volume 42, Issue 4, pp. 145–150, 2007.
37. О. О. Аваделькарим, Ч. Бай и С. П. Капица. *Нанонаука и нанотехнологии. Энциклопедия систем жизнеобеспечения.* Дом МАГИСТР-ПРЕСС, EOLLS, ЮНЕСКО, Организация Объединённых Наций по вопросам образования науки и культуры, 2011.
38. T. Chakraborty. Nanoscopic Quantum Rings: A New Perspective. *Advances in Solid State Physics*, Volume 43, 2003.
39. T. Chakraborty and P. Pietiläinen. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. *Physical Review B*, Volume 50, 1994.
40. G. Qin and S. Ren. Effects of core size and shell thickness on phonon modes in GaAs/AlAs shell quantum dots. *Journal of Applied Physics*, Volume 89, Issue 11, pp. 6037–6043, 2001.

41. V. A. Harutyunyan. Optical transitions in semiconductor nanospherical layer under the presence of perturbing electrical field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 39, Issue 1, pp. 37–49, 2007.
42. E. M. Kazaryan, A. A. Kirakosyan, V. N. Mughnetsyan and H. A. Sarkisyan. Tunability of absorption threshold frequencies and Stark shift in the InSb narrow gap spherical quantum layer. *Semicon. Sci. Techn.*, Volume 27, Issue 8, 2012.
43. D. S. L. Abergel. Excitonic condensation in spatially separated one-dimensional systems. *Applied Physics Letters*, Volume 106, Issue 21, 2015.
44. A. Sitek, L. Serra, V. Gudmundsson and A. Manolescu. Electron localization and optical absorption of polygonal quantum rings. *Physical Review B*, Volume 91, Issue 23, 2015.
45. V. V. Arsoški, N. A. Čukarić, M. Ž. Tadić, F. M. Peeters. An efficient finite-difference scheme for computation of electron states in free-standing and core–shell quantum wires. *Computer Physics Communications*, Volume 197, pp. 17–26, 2015.
46. A. Sitek, G. Thorgilsson, V. Gudmundsson, A. Manolescu. Multi-domain electromagnetic absorption of triangular quantum rings. *Nanotechnology*, Volume 27, Issue 22, 2016.
47. P. Ghosh, D. Kushavah, P. K. Mohapatra, P. Vasa, K. C. Rustagi and B. P. Singh. Investigations of temperature-dependent photoluminescence of uncoated and silver-coated CdS quantum dots. *Eprint arXiv:1606.06711*, 2016.
48. E. M. Kazaryan, A. A. Kirakosyan, V. N. Mughnetsyan and H. A. Sarkisyan. Tunability of absorption threshold frequencies and Stark shift in spherical quantum layer. *Photonics and Micro-and Nano-structured Materials*, 2011.
49. H. A. Sarkisyan. Electronic states in a cylindrical quantum dot in the presence of parallel electrical and magnetic fields. *Modern Physics Letters B*, Volume 16, Issue 22, 2002.
50. M. S. Atoyán, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Interband light absorption in parabolic quantum dot in the presence of electrical and magnetic

- fields. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 31, Issue 1, 2006.
51. M. S. Atoyan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Direct interband light absorption in a cylindrical quantum dot in quantizing magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 22, Issue 4, 2004.
52. P. Pietiläinen and T. Chakraborty. Energy levels and magneto-optical transitions in parabolic quantum dots with spin-orbit coupling. *Physical Review B*, Volume 73, 2006.
53. A. Wong, A. T. Ngo and S. E. Ulloa. Magnetic-field-induced mixed-level Kondo effect in two-level systems. *Physical Review B*, Volume 94, Issue 15, 2016.
54. A. Belouad, Y. Zahidi and A. Jellal. AA-stacked bilayer graphene quantum dots in magnetic field. *Materials Research Express*, Volume 3, Issue 5, 2016.
55. F. Jingtao, C. Yuansen, Ch. Gang, X. Liantuan, J. Suotang and N. Franco. Electric-field-induced interferometric resonance of a one-dimensional spin-orbit-coupled electron. *Nature Scientific Reports*, Volume 6, 2016.
56. L. L. Li, M. Zarenia, W. Xu, H. M. Dong and F. M. Peeters. Exciton states in a circular graphene quantum dot: magnetic field induced intravalley to intervalley transition. *Eprint arXiv:1612.08031*, 2016.
57. A. N. Rauf, A. H. Fatah and M. A. Jabar. Effects of magnetic field on photon induced quantum transport in a single dot-cavity system. *Chinese Physics B*, Volume 25, Issue 11, 2016.
58. G. Yu. Kryuchkyan, V. Shahnazaryan, O. V. Kibis and I. A. Shelykh. Resonance fluorescence from an asymmetric quantum dot dressed by a bichromatic electromagnetic field. *Eprint arXiv:1611.03678*, 2016.
59. V. A. Harutyunyan. Electro-optical transitions in a semiconductor cylindrical nanolayer. *Phys. of the Solid State*, Volume 54, Issue 5, pp. 1096–1103, 2012.
60. V. A. Harutyunyan, K. S. Aramyan and H. Sh. Petrosyan. Optical transitions in spherical quantized layer under the presence of radial electrical field. *Physica E:*

Low-dimensional Systems and Nanostructures. Volume 21, Issue 1, p. 111-116, 2004.

61. H. M. Baghramyan, M. G. Barseghyan, C. A. Duque and A. A. Kirakosyan. Binding energy of hydrogenic donor impurity in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs concentric double quantum rings: effects of geometry, hydrostatic pressure, temperature, and aluminum concentration. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 48, pp. 164–170, 2013.

62. A. Radu, A. A. Kirakosyan, D. Laroze and M. G. Barseghyan. The effects of the intense laser and homogeneous electric fields on the electronic and intraband optical properties of a GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As quantum ring. *Semiconductor Science and Technology*, Volume 30, Issue 4, 2015.

63. A. Kh. Manaselyan, M. G. Barseghyan, A. A. Kirakosyan, D. Laroze and C. A. Duque. Effects of applied lateral electric field and hydrostatic pressure on the intraband optical transitions in a GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum ring. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 60, pp. 95–99, 2014.

64. H. Goan. Monte-Carlo method for a quantum measurement process by a single-electron transistor. *Physical Review B*, Volume 70, 2004.

65. A. Hosseinzadeh and S. Shahpoor. A single electron transistor with quantum rings. *Eprint arXiv:1610.06615*, 2016.

66. E. Enrico, E. Strambini and F. Giazotto. Quantum Interference Hybrid Single-Electron Transistor. *Eprint arXiv:1609.08525*, 2016.

67. E. Enrico and F. Giazotto. Superconducting Quantum Interference Single-Electron Transistor. *Physical Review Applied*, Volume 5, Issue 6, 2016.

68. D. V. Averin and J. P. Pekola. Nonadiabatic Charge Pumping in a Hybrid Single-Electron Transistor. *Physical Review Letters*, Volume 101, 2008.

69. N. Lebedeva, A. Varpula, S. Novikov and P. Kuivalainen. Magnetic polarons in ferromagnetic semiconductor single-electron transistors. *Physical Review B*, Volume 81, 2010.

70. F. Hohls, C. Flindt, C. Fricke, N. Ubbelohde and R. J. Haug. Measurement of finite-frequency current statistics in a single-electron transistor. *Nature Communications*, Volume 3, 2012.
71. M. Miralaie, M. Leilaieoun, K. Abbasian and M. Hasani. Long wavelength infrared photodetector design based on electromagnetically induced transparency. *J. Comp. Theor. Nanosc.*, Volume 11, Issue 15, 2014.
72. S. Flugge. *Practical quantum mechanics. I, II.* Springer-Verlag, Berlin, 1971.
73. И. М. Цидильковский. *Электроны и дырки в полупроводниках: Энергетический спектр и динамика.* Москва, Наука, 1972.
74. M. Zoheir, A. Kh. Manaselyan and H. A. Sarkisyan. Magneto- and electroabsorption in narrow-gap InSb cylindrical layer quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 40, Issue 8, pp. 1583–1590, 2008.
75. М. М. Бредов, В. В. Румянцев, И. Н. Топтыгин. *Классическая электродинамика.* Москва, Наука, 1985.
76. Ю. В. Кафтanova. *Специальные функции математической физики.* “Новое слово”, 2009.
77. А. С. Давыдов. *Теория атомного ядра.* Москва, Государственное издательство физико-математической литературы, 1958.
78. N. G. Aghekyan, S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Spin magnetic moment and persistent orbital currents in cylindrical nanolayer. *Superlattices and Microstructures*, Volume 69, pp. 87–98, 2014.
79. S. M. Amirkhanyan, H. A. Sarkisyan and E. M. Kazaryan. Calculation of electrostatic multipoles of electron localized in narrow-band InSb spherical nanolayer. *Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Science)*, Volume 50, Issue 3, pp. 268–276, 2015.
80. R. Loudon. One-Dimensional Hydrogen Atom. *Am. J. Phys.*, Volume 27, Issue 9, pp. 649–655, 1959.

81. D. S. Chuu, C. M. Hsiao and W. N. Mei. Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires. *Physical Review B*, Volume 46, 1992.
82. Л. Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика*. М., Наука, 1989.
83. D. B. Hayrapetyan, E. M. Kazaryan, L. S. Petrosyan and H. A. Sarkisyan. Core/shell/shell spherical quantum dot with Kratzer confining potential: Impurity states and electrostatic multipoles. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 66, pp. 7–12, 2015.
84. H. Taş and M. Şahin. The inter-sublevel optical properties of a spherical quantum dot-quantum well with and without a donor impurity. *Journal of Applied Physics*, Volume 112, Issue 5, 2012.
85. H. Taş and M. Şahin. The electronic properties of a core/shell/well/shell spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity. *Journal of Applied Physics*, Volume 111, Issue 8, 2012.
86. A. R. Jafari and Y. Naimi. Linear and nonlinear optical properties of multi-layered spherical nano-systems with donor impurity in the center. *Eprint arXiv:1301.2818*, 2013.
87. A. R. Jafari and Y. Naimi. Oscillator strengths of the intersubband electronic transitions in the multi-layered nano-antidots with hydrogenic impurity. *Eprint arXiv:1301.2810*, 2013.
88. G. D. Sanders and C. J. Stanton. Magneto-optical properties of core/shell quantum dots doped with radial position controlled magnetic impurities. *APS March Meeting*, 2014.
89. C. M. Duque, M. G. Barseghyan and C. A. Duque. Donor impurity in vertically-coupled quantum-dots under hydrostatic pressure and applied electric field. *The European Physical Journal B*, Volume 73, Issue 3, pp. 309–319, 2010.
90. M. E. Mora-Ramos, M. G. Barseghyan and C. A. Duque. Excitons in cylindrical GaAs Pöschl–Teller quantum dots: Hydrostatic pressure and temperature effects. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 43, Issue 1, pp. 338–344, 2010.

91. A. Hakimyfard, M. G. Barseghyan, C. A. Duque and A. A. Kirakosyan. Simultaneous effects of pressure and temperature on donor binding energy in Pöschl–Teller quantum well. *Physica B: Condensed Matter*, Volume 404, Issue 23, 2009.
92. D. B. Hayrapetyan, E. M. Kazaryan and H. Kh. Tevosyan. Direct interband light absorption in the cylindrical quantum dot with modified Pöschl–Teller potential. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 46, pp. 274–278, 2012.
93. A. H. Rodríguez, C. Trallero-Giner, C. A. Duque and G. J. Vázquez. Optical transition in self-assembled InAs/GaAs quantum lens under high hydrostatic pressure. *Journal of Applied Physics*, Volume 105, Issue 4, pp. 044308–044308–6, 2009.
94. S. S. Krishtopenko, I. Yahniuk, D. B. But, V. I. Gavrilenko, W. Knap and F. Teppe. Pressure- and temperature-driven phase transitions in HgTe quantum wells. *Physical Review B*, Volume 94, Issue 24, 2016.
95. B. Vaseghi and T. Sajadi. Simultaneous effects of pressure and temperature on the binding energy and diamagnetic susceptibility of a laser dressed donor in a spherical quantum dot. *Physica B: Condensed Matter*, Volume 407, Issue 14, 2012.
96. A. J. Peter. Diamagnetic susceptibility of a laser dressed donor in a quantum well. *Superlattices and Microstructures*, Volume 47, pp. 442–451, 2010.
97. G. Rezaei and N. A. Doostimotlagh. External electric field, hydrostatic pressure and conduction band non-parabolicity effects on the binding energy and the diamagnetic susceptibility of a hydrogenic impurity quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 44, Issue 4, 2012.
98. A. J. Peter. The effect of hydrostatic pressure on binding energy of impurity states in spherical quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 28, Issue 3, pp. 225–229, 2005.
99. G. Rezaei, N. A. Doostimotlagh and B. Vaseghi. Simultaneous Effects of Hydrostatic Pressure and Conduction Band Non-parabolicity on Binding Energies

- and Diamagnetic Susceptibility of a Hydrogenic Impurity in Spherical Quantum Dots. *Commun. Theor. Phys.*, Volume 56, pp. 377–381, 2011.
100. A. J. Peter and J. Ebenezar. Diamagnetic Susceptibility of a Confined Donor in a Quantum Dot with Different Confinements. *J. Sci. Res.*, Volume 1, Issue 2, pp. 200–208, 2009.
101. C. Bose. Perturbation calculation of impurity states in spherical quantum dots with parabolic confinement. *Physica E: Low dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 4, Issue 3, pp. 180–184, 1999.
102. B. K. Tangudu, A. Bhaskar, M. E. Abhinav, G. Bahniman and B. Bhupesh. Performance Analysis of Spin Transfer Torque Random Access Memory with cross shaped free layer using Heusler Alloys by using micromagnetic studies. *Eprint arXiv:1401.6971*, 2014.
103. Wen-Qi Fang and Bang-Gui Liu. Exact magnetic field control of nitrogen-vacancy center spin for realizing fast quantum logic gates. *Physical Review B*, Volume 92, Issue 17, 2015.
104. J. Casanova, Z.-Y. Wang and M. B. Plenio. Noise-Resilient Quantum Computing with a Nitrogen-Vacancy Center and Nuclear Spins. *Physical Review Letters*, Volume 117, Issue 13, 2016.
105. M. Veldhorst, H. G. J. Eenink, C. H. Yang and A. S. Dzurak. Silicon CMOS architecture for a spin-based quantum computer. *Eprint arXiv:1609.09700*, 2016.
106. S. Hoffman, C. Schrade, J. Klinovaja and D. Loss. Universal quantum computation with hybrid spin-Majorana qubits. *Physical Review B*, Volume 94, Issue 4, 2016.
107. E. Castro-Ruiz and E. Nahmad-Achar. Entanglement properties of a two spin-one particle system under a Lorentz transformation. *Eprint arXiv:1210.1889*, 2012.
108. N. Pilgram and T. D. Gutierrez. Spontaneous Quantum Teleportation in a Quenched Spin Lattice. *Eprint arXiv:1511.02272*, 2015.

109. A. N. Pyrkov and T. Byrnes. Quantum teleportation of spin coherent states: beyond continuous variables teleportation. *New Journal of Physics*, Volume 16, Issue 7, 2014.
110. A. Mizel. Gapped spin Hamiltonian motivated by quantum teleportation. *Eprint arXiv:1410.1928*, 2014.
111. W. B. Gao, P. Fallahi, E. Togan, A. Delteil, Y. S. Chin, J. Miguel-Sanchez and A. Imamoglu. Quantum teleportation from a propagating photon to a solid-state spin qubit. *Nature Communications*, Volume 4, 2013.
112. M. R. Frey, K. Gerlach and M. Hotta. Quantum energy teleportation between spin particles in a Gibbs state. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Volume 46, Issue 45, 2013.
113. M. Hotta. Ground-state-entanglement bound for quantum energy teleportation of general spin-chain models. *Physical Review A*, Volume 87, Issue 3, 2013.
114. J. Trevison and M. Hotta. Quantum energy teleportation across a three-spin Ising chain in a Gibbs state. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Volume 48, Issue 17, 2015.
115. N. G. Aghekyan, H. A. Sarkisyan, E. M. Kazaryan and A. A. Kostanyan. Two electronic states and state exchange time control in spherical nanolayer. *Superlattices and Microstructures*, Volume 50, Issue 3, pp. 199–206, 2011.
116. D. A. Baghdasaryan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Two-electron states and state exchange time control in parabolic quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 58, pp. 67–72, 2014.
117. D. A. Baghdasaryan, H. Ts. Ghaltaghchyan, E. M. Kazaryan and H.A. Sarkisyan. Two-electron impurity in the parabolic quantum dot: Uncertainty relation and perturbation approach. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 70, pp. 52–57, 2015.
118. А. С. Давыдов. *Квантовая механика*. “Наука”, 1973.
119. K. Mita. Virtual probability current associated with the spin. *Am. J. Phys.*, Volume 68, Issue 3, 2000.

120. H. C. Ohanian. What is spin ? *Am. J. Phys.* Volume 54, Issue 6, pp. 500–505, 1986.
121. M. V. Berry. Optical currents. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, Volume 11, Number 9, 2009.
122. W. B. Hodge, S. V. Migirditch and W. C. Kerr. Electron spin and probability current density in quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, Volume 82, Issue 681, 2014.
123. A. K. Atayan, E. M. Kazaryan, A. V. Meliksetyan and H. A. Sarkisyan. Magneto-absorption in cylindrical quantum dots. *The European Physical Journal B*, Volume 63, Issue 4, pp. 485–492, 2008.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. С. М. Амирханян. Ток спинового магнитного момента электрона в сферической квантовой точке. *Вестник РАУ* №2, 51–60, 2013.
2. N. G. Aghekyan, S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan and H.A. Sarkisyan. Spin magnetic moment and persistent orbital currents in cylindrical nanolayer. *Superlattices and Microstructures*, Volume 69, pp. 87–98, 2014.
3. S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Spin magnetic moment current of impurity electron in a spherical quantum dot. *Journal of Contemporary Physics* (Armenian Academy of Sciences), Volume 49, Issue 6, pp. 264–271, 2014. (С. М. Амирханян, Э. М. Казарян, А. А. Саркисян. Ток спинового магнитного момента примесного электрона в сферической квантовой точке. *Известия НАН Армении, Физика*, т. 49, №6, с. 400–409, 2014).
4. S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan. Calculation of electrostatic multipoles of electron localized in narrow-band InSb spherical nanolayer. *Journal of Contemporary Physics* (Armenian Academy of Sciences) , Volume 50, Issue 3, 2015. (С. М. Амирханян, Э. М. Казарян, А. А. Саркисян. Вычисление электростатических мультиполей электрона, локализованного в узкозонном сферическом наносле InSb. *Известия НАН Армении, Физика*, т. 50, №3, с. 357–367, 2015).
5. S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Electrostatic multipoles created by electron localized in narrow-band cylindrical nanolayer. *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 673, 2016.
6. D. B. Hayrapetyan, S. M. Amirkhanyan, E. M. Kazaryan and H. A. Sarkisyan. Effect of hydrostatic pressure on diamagnetic susceptibility of hydrogenic donor impurity in core/shell/shell spherical quantum Dot with Kratzer confining potential. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 84, pp. 367–371, 2016.

БЛАГОДАРНОСТИ

Выражаю глубокую благодарность и признательность моему научному руководителю – д. ф.-м. н., профессору А. А. Саркисяну за руководство диссертацией и поддержку, оказанную при выполнении работы.

Считаю приятным долгом выразить благодарность директору ИМВТ РАУ академику НАН РА Э. М.Казаряну за ценные советы и внимание относительно написания диссертационной работы.

Искренне благодарен своим соавторам, к. ф.-м. н., доценту Д. Б. Айрапетяну и к. ф.-м. н. Н. Г. Агекяну за совместную научную работу.