РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ В ГРАФЕНОВЫХ ПЛАНАРНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ: ПСЕВДОСПИНОВОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА, ПРИГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ЭКСИТОНЫ

П. В. Ратников^{*}, А. П. Силин

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук 119991, Москва, Россия

> Поступила в редакцию 21 апреля 2010 г. после переработки 1 августа 2011 г.

Рассматривается планарная квантовая яма, составленная из нанополоски бесщелевого графена, по краям которой находятся щелевые модификации графена. Показано, что в несимметричной квантовой яме появляется псевдоспиновое расщепление спектра размерного квантования носителей тока. Исследовано квантование Ландау энергетического спектра. Рассмотрен новый тип приграничных состояний, возникающий при пересечении дисперсионных кривых щелевой и бесщелевой модификаций графена. Рассчитывается спектр экситона в планарной квантовой яме. Рассмотрено влияние внешнего электрического поля на спектр экситона.

1. ВВЕДЕНИЕ

Получение графена — одноатомного слоя атомов углерода, образующих правильную гексагональную решетку [1–3], — стимулировало обширную деятельность по его изучению в разных направлениях. Графен интенсивно исследуется экспериментально и теоретически. Благодаря своим уникальным свойствам графен является перспективным материалом для углеродной наноэлектроники нового поколения. Например, подвижность носителей тока в графене достигает 2 · 10⁵ см²/В·с, а транспорт в субмикронных образцах может быть баллистическим [4, 5].

За последние семь лет появилось множество теоретических и экспериментальных работ по исследованию электронных свойств узких полосок графена нанометровой ширины (нанополосок). Одними из первых были сделаны работы по изучению электронных состояний нанополосок графена с использованием уравнения Дирака с соответствующими граничными условиями [6, 7]. Электронные свойства нанополоски графена сильно зависят от ее размера и геометрии краев [8]. По своим транспортным свойствам нанополоски графена во многом напоминают углеродные нанотрубки [9, 10], поскольку в них свободное движение носителей тока также одномерно.

Недавно был создан транзистор на основе нанополоски графена шириной 2 нм и длиной 236 нм (исследовались также нанополоски шириной 10–60 нм) [11]. Нанополоска графена была взята настолько узкой, чтобы гарантировать возникновение достаточно широкой энергетической щели, необходимой для работы транзистора при комнатной температуре. Однако по компактности он несколько уступает транзистору на основе графеновой квантовой точки диаметром 30 нм [12].

В настоящей работе мы исследуем планарную квантовую яму, составленную из нанополоски графена, по краям которой находятся его щелевые модификации.

Щелевые модификации графена можно получить несколькими способами. Во-первых, энергетическая щель может открываться за счет того, что графен наносится на подложку не из SiO₂, а из гексагонального нитрида бора (*h*-BN). При этом две треугольные подрешетки графена становятся неэквивалентными и образуется щелевая модификация с энергетической щелью 53 мэВ [13]. Во-вторых, графен, эпитаксиально выращенный на подложке SiC, также обладает ненулевой энергетической ще-

^{*}E-mail: ratnikov@lpi.ru



Рис.1. Два варианта рассматриваемой системы: a - слой графена на подложке, составленной из двух полосокh-BN и вставленной между ними нанополоски SiO₂ ширины <math>d; $\delta -$ неоднородно гидрогенизированный графен на подложке из SiO₂ (d - ширина негидрогенизированной нанополоски графена), где светлые кружки – атомы водорода, располагающиеся так, что с одной стороны графенового листа они соединены с атомами углерода одной подрешетки, а с другой стороны – с атомами углерода другой подрешетки

лью [14], которая, согласно экспериментальным данным, полученным с использованием фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением, равна 0.26 эВ [15]. В-третьих, недавно гидрогенизацией синтезирована еще одна модификация графена графан [16], — в которой, согласно расчетам, прямая энергетическая щель в Г-точке равна 5.4 эВ [17]. В-четвертых, согласно расчетам ab initio энергетическая щель в графене с осажденными молекулами CrO₃ равна 0.12 эВ [18]. В первых двух случаях можно наносить графен на неоднородную подложку h-BN — нанополоска SiO₂-h-BN или SiC — нанополоска SiO₂-SiC (на рис. 1*а* изображен вариант с *h*-BN). В последних двух случаях берется неоднородно гидрогенизированный графен (негидрогенизированная нанополоска, рис. 1б) или графен с неоднородным осаждением молекул CrO₃ (молекулы CrO₃ не осаждаются на нанополоске). Возможна

атомах углерода находятся атомы водорода), вследствие чего появляется возможность изменения величины энергетической щели. Можно использовать различные комбинации указанных способов. В последнее время интенсивно ведутся экспериментальные исследования графена на подложках из различных материалов, в частности из редкоземельных металлов [19–21]. Не исключено, что открыть энергетическую щель в спектре графена можно с помощью осаждения на него других молекул или посредством расположения графена на подложке из каких-нибудь иных материалов. Использование щелевых модификаций графена в качестве потенциальных барьеров открывает дополнительные возможности для углеродной зонной технологии [22].

также неполная гидрогенизация графена (не на всех

Мы предполагаем, что оба гетероконтакта нанополоски с щелевыми модификациями графена являются контактами типа I (классификация контактов приведена, например, в монографии [23]), т. е. дираковские точки бесщелевого графена по энергии попадают в запрещенные зоны окружающих его щелевых модификаций графена. Это необходимо для того, чтобы избежать спонтанного рождения электронно-дырочных пар, что привело бы к шунтированию приборов углеродной наноэлектроники на основе графена, таких, например, как полевой транзистор.

Мы считаем, что планарные гетероструктуры на основе графена и его щелевых модификаций являются перспективными для развития углеродной наноэлектроники. Использование одного бесщелевого графена не может отразить все многообразие возможностей, которое дает зонная технология, использующая и щелевые модификации графена.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 излагаются предварительные замечания, поясняющие некоторые вопросы теории квазирелятивистских фермионов в графене. В разд. 3 сформулирована модель, являющаяся обобщением модели Дирака для графена. В разд. 4 рассмотрено размерное квантование исходно безмассовых носителей тока в планарной квантовой яме на основе графена. В разд. 5 изучаются приграничные состояния. Возникновение эффективной щели в спектре размерного квантования рассматриваемой гетероструктуры дает возможность образования экситонов при оптическом возбуждении. Спектр экситона рассчитывается в разд. 6. В разд. 7 рассматривается влияние внешнего однородного электрического поля на экситон. Некоторые экспериментальные проявления исследованных в статье эффектов обсуждаются в разд. 8. Основные результаты, полученные в статье, и их обсуждение приведены в Заключении (разд. 9).

2. ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

В нашей предыдущей работе [24] мы исследовали планарную гетероструктуру, составленную из двух моноатомных слоев узкощелевых полупроводников и полоски графена. Рассматривались состояния с определенной четностью λ — собственным значением оператора четности [25]

$$\widehat{P} = i\gamma_4\widehat{\Lambda}_{\mathbf{n}},\tag{1}$$

где $i\gamma_4$ — оператор инверсии,

$$\widehat{\Lambda}_{\mathbf{n}} = \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{n}\right) = -i\mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{n}$$



Рис.2. Первая зона Бриллюэна графена, в угловых (дираковских) точках которой энергетический спектр носителей тока линеен. Показаны векторы обратной решетки $\mathbf{b}_1 = (2\pi/3a, 2\pi/\sqrt{3}a)$ и $\mathbf{b}_2 = (2\pi/3a, -2\pi/\sqrt{3}a)$, где a = 1.42 Å — межатомное расстояние. Эти два вектора и соответствующие штриховые линии дают эквивалентное представление первой зоны Бриллюэна в виде ромба

— оператор вращения на угол π вокруг оси **n**, перпендикулярной плоскости гетероструктуры, в стандартном представлении

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix},$$

 σ — матрицы Паули,

$$\gamma_4 \equiv \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

I — единичная матрица 2 × 2. Легко видеть, что оператор (1) совпадает с оператором четности $i\gamma_5 \hat{n}$ квантовой электродинамики, где $\hat{n} = \gamma \cdot \mathbf{n}$,

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = i \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}.$$

Собственные волновые функции этого оператора описывают поляризационные состояния электрона [26].

Состояния носителей тока в графене можно описывать спиральностью — собственным числом оператора спиральности $\hat{h} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}/2|\mathbf{p}|$. Проекция псевдоспина на направление квазиимпульса **p** определяет принадлежность электронов или дырок к одной из двух долин (*K*- или *K'*-точки зоны Бриллюэна, рис. 2). Положительное значение спиральности соответствует электронам в окрестности *К*-точки и дыркам в окрестности *К'*-точки, а отрицательное значение — электронам в окрестности *К'*-точки и дыркам в окрестности *К*-точки [27].

В случае нулевой массы состояния с противоположной спиральностью независимы [28]. Носители тока обладают дополнительной симметрией — киральной симметрией (сохраняется спиральность). В этом случае, как и в случае массивных носителей тока, также можно ввести четность¹⁾. Тем самым повышенная симметрия безмассовых носителей тока выражается в наличии у них дополнительного квантового числа — спиральности. Четность «различает» состояния лишь по долинам ($\lambda = 1$ для состояний в окрестности K-точки и $\lambda = -1$ для состояний в окрестности K'-точки), а спиральность помимо этого свойства также обладает свойством «отличать» частицу (электрон) от античастицы (дырки). Однако для массивных носителей тока киральная симметрия нарушается, и спиральность в этом случае не является квантовым числом. Чтобы описать состояния носителей тока в планарной графеновой гетероструктуре, в которой используются как бесщелевой графен, так и его щелевые модификации, эти состояния следует характеризовать четностью.

Напомним, что вывод уравнения Дирака, описывающего безмассовые носители тока в графене, предполагает их двухдолинными и бесспиновыми [10]. Получающееся уравнение Дирака является матричным 4 × 4. Рассматривая носители тока в одной долине, можно по аналогии с нейтрино перейти к уравнению Вейля, которое совпадает с матричным 2 × 2-представлением уравнения Дирака для безмассовой частицы в двух пространственных измерениях [30]. Для исследования энергетического спектра носителей тока в планарных гетероструктурах, составленных из щелевых и бесщелевых модификаций графена, представление 2 × 2 оказывается недостаточным. По аналогичным причинам базис матриц 2 × 2, являющийся представлением алгебры Дирака, недостаточен для описания нарушения киральной симметрии в квантовой электродинамике в двух пространственных измерениях [31].

Описывая носители тока в графеновой наноструктуре двумерным уравнением Дирака 4 × 4, мы можем исследовать псевдоспиновые эффекты аналогично тому, как это делается для узкощелевых полупроводниковых гетероструктур в рамках модели Дирака [32]. Последнее обстоятельство дает возможность применить для графеновых гетероструктур методы, использованные для решения задач спинтроники узкощелевых полупроводниковых гетероструктур [33–40].

В случае планарной гетероструктуры на основе графена речь идет о возможности управления псевдоспином носителей тока и, следовательно, о влиянии на заполнение долин графена. Такая гетероструктура может быть использована в «долиннотронике» (valleytronics) [41–47]. Зависимость свойств носителей тока от псевдоспина проявляется в псевдоспиновом расщеплении спектра размерного квантования (см. ниже разд. 4).

3. МОДЕЛЬ

Для того чтобы описать размерное квантование в графеновых гетероструктурах, необходимо записать уравнение для огибающей волновой функции с учетом массового члена. Энергетическая щель в спектре графена возникает вследствие нарушения симметрии между двумя треугольными подрешетками гексагональной решетки графена. В этом случае гамильтониан в приближении сильной связи, учитывающий перескоки электронов между соседними атомами, имеет вид [48]

$$\hat{H} = -t \sum_{\mathbf{B},i,\sigma} \left[a_{\sigma}^{\dagger} (\mathbf{B} + \mathbf{d}_{i}) b_{\sigma} (\mathbf{B}) + b_{\sigma}^{\dagger} (\mathbf{B}) a_{\sigma} (\mathbf{B} + \mathbf{d}_{i}) \right] + \Delta \sum_{\mathbf{B},\sigma} \left[a_{\sigma}^{\dagger} (\mathbf{B} + \mathbf{d}_{1}) a_{\sigma} (\mathbf{B} + \mathbf{d}_{1}) - b_{\sigma}^{\dagger} (\mathbf{B}) b_{\sigma} (\mathbf{B}) \right], \quad (2)$$

где $t \approx 2.8$ эВ — зонный параметр, радиус-вектор В пробегает по всем возможным положениям атомов подрешетки B, векторы \mathbf{d}_i (i = 1, 2, 3) соединяют атом подрешетки B с тремя соседними атомами углерода подрешетки A (рис. 3),

$$\mathbf{d}_1 = \left(\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right), \quad \mathbf{d}_2 = \left(\frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{2}a\right),$$

a — постоянная решетки, $\sigma =\uparrow, \downarrow$ — спиновый индекс, $a_{\sigma} (a_{\sigma}^{\dagger})$ и $b_{\sigma} (b_{\sigma}^{\dagger})$ — операторы уничтожения (рождения) электрона соответственно на атоме подрешетки A и на атоме подрешетки B, параметр Δ характеризует разность энергий электрона на атомах

 $\mathbf{d}_3 = (-a, 0),$

¹⁾ В безмассовом случае состояния могут характеризоваться как парой квантовых чисел спиральность и знак энергии, так и парой квантовых чисел спиральность и собственное значение оператора $i\gamma_5$ [29, с. 117]. Четность совпадает с собственным значением оператора $i\gamma_5$.

A

B

В



B

А В Рис. 3. Часть гексагональной решетки, на которой показаны векторы d_i, соединяющие атом углерода подрешетки B с тремя соседними атомами углерода подрешетки A

 \mathbf{d}_2

Α

разных подрешеток (при $\Delta = 0$ восстанавливается симметрия между двумя подрешетками и графен становится бесщелевым; из изложенного ниже видно, что Δ играет роль полуширины запрещенной зоны в щелевой модификации графена).

С помощью преобразования Фурье перейдем в импульсное представление:

$$a_{\sigma}(\mathbf{A}) = \int_{\Omega_{B}} \frac{d^{2}k}{(2\pi)^{2}} a_{\sigma}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}},$$
$$b_{\sigma}(\mathbf{B}) = \int_{\Omega_{B}} \frac{d^{2}k}{(2\pi)^{2}} b_{\sigma}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{B}},$$

где Ω_B указывает на то, что интегрирование проводится по первой зоне Бриллюэна.

Гамильтониан (2) перепишется в виде

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= \sum_{\sigma} \int_{\Omega_B} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(a_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \, b_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \right) \times \\ &\times \left(\begin{array}{c} \Delta & -t \sum_{i=1}^{3} \exp\left(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{i} \right) \\ -t \sum_{i=1}^{3} \exp\left(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{i} \right) & -\Delta \end{array} \right) \times \\ &\times \left(\begin{array}{c} a_{\sigma}(\mathbf{k}) \\ b_{\sigma}(\mathbf{k}) \end{array} \right). \end{aligned}$$
(3)

Экстремумы зоны проводимости и валентной зоны находятся в угловых точках первой зоны Бриллюэна. Разложим гамильтониан (3) около *К*-точки с квазиимпульсом $\mathbf{q}_1 = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$ и около *К'*-точки с квазиимпульсом $\mathbf{q}_2 = (2\pi/3a, -2\pi/3\sqrt{3}a)$:

$$\widehat{H} = \sum_{\sigma} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \widehat{\Psi}^{\dagger}_{\sigma}(\mathbf{k}) \widehat{\mathcal{H}} \widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{k})$$

Здесь интегрирование проводится в достаточно малых окрестностях *К*- и *К'*-точек. Гамильтониан, описывающий носители тока вблизи угловых точек, имеет вид

$$\widehat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} + \Delta \sigma_z & 0\\ 0 & v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{k} + \Delta \sigma_z \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где $v_F = 3at/2$ — скорость Ферми носителей тока, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ и $\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ — матрицы Паули, действующие в пространстве двух подрешеток, биспинор $\widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{k})$ мы определили следующим образом:

$$\widehat{\Psi}_{\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \widehat{\Psi}_{\sigma}^{(1)}(\mathbf{k}) \\ \widehat{\Psi}_{\sigma}^{(2)}(\mathbf{k}) \end{pmatrix},$$

где

$$\widehat{\Psi}_{\sigma}^{(1,2)}(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{5\pi i}{12}\sigma_z\right)\sigma_z \begin{pmatrix} a_{\sigma}(\mathbf{q}_{1,2}+\mathbf{k})\\ b_{\sigma}(\mathbf{q}_{1,2}+\mathbf{k}) \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим гетероструктуру, составленную из двух щелевых модификаций графена (x < 0 — область 1, x > d — область 3) и нанополоски графена (0 < x < d — область 2). Ось z направим перпендикулярно плоскости гетероструктуры, а ось x — перпендикулярно границам раздела нанополоски графена и щелевых модификаций графена, ось y направлена вдоль границ раздела (см. рис. 1).

Используя гамильтониан (4), запишем уравнение для огибающей волновой функции в случае планарной гетероструктуры:

$$\begin{bmatrix} v_{Fj} \left(\tau_0 \otimes \sigma_x \hat{p}_x + \tau_z \otimes \sigma_y \hat{p}_y \right) + \\ + \tau_0 \otimes \sigma_z \Delta_j + \tau_0 \otimes \sigma_0 \left(V_j - E \right) \end{bmatrix} \Psi(x, y) = 0, \quad (5)$$

где $\Delta_j = E_{gj}/2$ (j = 1, 2, 3) — полуширины запрещенной зоны, $\Delta_1 \neq 0$, $\Delta_3 \neq 0$ (в областях 1 и 3), $\Delta_2 = 0$ (в области 2), V_1 и V_3 — работы выхода материалов в областях 1 и 3 (они определяют положение середин запрещенных зон этих материалов по отношению к дираковским точкам в графене, для начала отсчета выберем $V_2 = 0$, рис. 4). Матрица σ_0 — единичная матрица 2 × 2, действующая в пространстве



Рис. 4. Рассматриваемая квантовая яма

двух подрешеток. Матрица τ_0 , являющаяся единичной матрицей 2×2 , и матрица τ_z , которая определяется так же, как матрица Паули σ_z , действуют в пространстве двух долин. Знак « \otimes » означает прямое произведение матриц. Операторы $\hat{p}_x = -i\partial/\partial x$ и $\hat{p}_y = -i\partial/\partial y$ — операторы импульса ($\hbar = 1$). Мы предполагаем, что в общем случае значения скорости Ферми носителей тока в трех областях могут быть разными: v_{F1} и v_{F3} — для щелевых модификаций в областях 1 и 3, а для бесщелевого графена $v_{F2} \approx 10^8$ см/с.

Движение носителей тока вдоль оси *у* является свободным:

$$\Psi(x, y) = \Psi(x) \exp(ik_y y).$$

Волновая функция $\Psi(x)$ представляет собой биспинор:

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^{K}(x) \\ \psi^{K'}(x) \end{pmatrix},$$

где спиноры $\psi^{K}(x)$ и $\psi^{K'}(x)$ описывают носители тока соответственно в долинах K и K':

$$\psi^{K}(x) = \begin{pmatrix} \psi^{K}_{A}(x) \\ \psi^{K}_{B}(x) \end{pmatrix}, \quad \psi^{K'}(x) = \begin{pmatrix} \psi^{K'}_{A}(x) \\ \psi^{K'}_{B}(x) \end{pmatrix}.$$

В нашем случае оператор четности выражается следующим образом:

$$\widehat{P} = \tau_z \otimes \sigma_0. \tag{6}$$

Будем решать уравнение (5) в классе собственных волновых функций $\Psi_{\lambda}(x)$ оператора четности (6):

$$\widehat{P}\Psi_{\lambda}(x) = \lambda \Psi_{\lambda}(x),$$

$$\Psi_{+1}(x) = \begin{pmatrix} \psi_{+1}^{K}(x) \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\Psi_{-1}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{-1}^{K'}(x) \end{pmatrix}.$$
(7)

Уравнение (5) можно переписать в виде двух матричных уравнений 2×2 :

$$\left(-iv_{Fj}\sigma_x\frac{d}{dx} + v_{Fj}k_y\sigma_y + \lambda\Delta_j\sigma_z + V_j\right)\psi_{\lambda}^K(x) = E_{\lambda}\psi_{\lambda}^K(x), \quad (8)$$

$$\left(-iv_{Fj}\sigma_x\frac{d}{dx} - v_{Fj}k_y\sigma_y - \lambda\Delta_j\sigma_z + V_j\right)\psi_{\lambda}^{K'}(x) = E_{\lambda}\psi_{\lambda}^{K'}(x).$$
(9)

Легко видеть, что при $\Delta_j = 0$ и $V_j = 0$ мы возвращаемся к спинорным волновым функциям, описывающим киральные состояния либо в K-, либо в K'-точке. Можно ввести оператор спиральности \hat{h} . Однако при $\Delta \neq 0$, как было указано в предыдущем разделе, киральная симметрия нарушается. Вводится четность λ — собственное число оператора (6). Теперь только четность определяет принадлежность носителей тока к одной из двух долин, поскольку согласно (7) $\lambda = +1$ для состояний вблизи K-точки, описываемых уравнением (8), и $\lambda = -1$ для состояний вблизи K'-точки, описываемых уравнением (9).

При этом в щелевых модификациях графена долины связаны операцией обращения времени, \mathcal{T} , как и в бесщелевом графене. Это согласуется с тем, что k_y входит в уравнения (8) и (9) с противоположными знаками (как известно, $k_y \to -k_y$ при операции обращения времени \mathcal{T}). Нетрудно убедиться, используя явный вид оператора \mathcal{T} , что при \mathcal{T} также $\lambda \to -\lambda$. Действительно, направим ось k_y вдоль направления K-M-K' с началом отсчета в точке M (см. рис. 2); тогда при \mathcal{T} имеем $K \to K'$ и $K' \to K$.

Уравнения (8) и (9) эквивалентны одному матричному уравнению 2×2

$$\left(-iv_{Fj}\sigma_x\frac{d}{dx} + \lambda v_{Fj}k_y\sigma_y + \Delta_j\sigma_z + V_j\right)\psi_\lambda(x) = E_\lambda\psi_\lambda(x). \quad (10)$$

Здесь и в дальнейшем за ненадобностью опущены индексы K и K', указывающие на принадлежность носителей тока к одной их двух долин (этим свойством обладает четность λ).

Обратимся к вопросу о граничных условиях на границе раздела между различными модификациями графена. Отметим сразу, что этот вопрос более простой, чем для границы графена с вакуумом при описании краевых состояний [6, 49]. В нашем случае, чтобы получить граничные условия, необходимо установить, как связаны между собой функции $\psi_{\lambda}(l)$ и $\psi_{\lambda}(-l)$ при $l \to 0$ (рассматриваем границу раздела x = 0; вывод для границы x = d аналогичен). Значения l считаются малыми вплоть до атомных расстояний. Умножим слева обе части уравнения (10) на $\psi^{\dagger}_{\lambda}(x)$ и проинтегрируем его на отрезке [-l, l]. Воспользуемся малостью l и пренебрежем частью слагаемых, считая лидирующими членами слагаемые, содержащие производную по *x*. Тогда приходим к равенству $^{2)}$

$$\psi_{\lambda}^{(-)\dagger}(-l)v_{F1}\psi_{\lambda}^{(-)}(-l) = \psi_{\lambda}^{(+)\dagger}(l)v_{F2}\psi_{\lambda}^{(+)}(l),$$

где функция $\psi_{\lambda}^{(-)\dagger}$ соответствует области слева от границы (x < 0), а функция $\psi_{\lambda}^{(+)\dagger}$ — справа от границы (x > 0). Эти функции запишем в виде

$$\psi_{\lambda}^{(\pm)} = |\psi_{\lambda}^{(\pm)}| \exp(i\varphi^{(\pm)}).$$

Тогда выписанное выше равенство перепишется как

$$\sqrt{v_{F1}}|\psi_{\lambda}^{(-)}(-l)| = \sqrt{v_{F2}}|\psi_{\lambda}^{(+)}(l)|.$$

Чтобы окончательно получить граничные условия, предположим, что вблизи границы раздела фазы функций $\psi_{\lambda}^{(\pm)}$ различаются только на кратное 2π число:

$$\varphi^{(+)} = \varphi^{(-)} + 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Устремим *l* к нулю. Получаем следующее условие сшивания волновых функций [34, 35]:

$$\sqrt{v_F^{(-)}}\psi_{\lambda}^{(-)} = \sqrt{v_F^{(+)}}\psi_{\lambda}^{(+)},$$

где знаком «-» помечены величины, относящиеся к материалу, находящемуся слева от границы раздела, знаком «+» — справа от границы.

Приведем решение уравнения (10).

1) При x < 0

$$\psi_{\lambda}(x) = C \begin{pmatrix} 1\\ q_1 \end{pmatrix} e^{k_1 x}, \tag{11}$$

где

$$q_1 = -i \frac{v_{F1}(k_1 - \lambda k_y)}{E_\lambda - V_1 + \Delta_1},$$
$$v_{F1}k_1 = \sqrt{\Delta_1^2 - (E_\lambda - V_1)^2 + v_{F1}^2 k_y^2}.$$

2) При
$$0 < x < d$$

$$\psi_{\lambda}(x) = C \begin{pmatrix} \varkappa^{*} \\ q_{2} \varkappa^{*} \end{pmatrix} \exp(ik_{2}x) + C \begin{pmatrix} \varkappa \\ -q_{2} \varkappa \end{pmatrix} \exp(-ik_{2}x), \quad (12)$$

где

2

$$\epsilon = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{v_{F1}}{v_{F2}}} \left[1 + i \left(\frac{\lambda k_y}{k_2} + \frac{v_{F1}(k_1 - \lambda k_y) E_\lambda}{v_{F2} k_2 (E_\lambda - V_1 + \Delta_1)} \right) \right],$$

$$q_2 = \frac{v_{F2}(k_2 + i\lambda k_y)}{E_\lambda}, \quad E_\lambda = \pm v_{F2}\sqrt{k_2^2 + k_y^2},$$

плюс берется для электронов, а минус — для дырок. 3) Пр
иx>d

$$\psi_{\lambda}(x) = C \begin{pmatrix} \zeta \\ q_3 \zeta \end{pmatrix} \exp\left[-k_3(x-d)\right],$$
 (13)

где

$$\begin{aligned} \zeta &= \sqrt{\frac{v_{F1}}{v_{F3}}} \times \\ &\times \left[\cos(k_2 d) + \left(\frac{\lambda k_y}{k_2} + \frac{v_{F1} (k_1 - \lambda k_y) E_\lambda}{v_{F2} k_2 (E_\lambda - V_1 + \Delta_1)} \right) \sin(k_2 d) \right], \\ &\qquad q_3 = i \frac{v_{F3} (k_3 + \lambda k_y)}{V_1 + V_2 + V_2}, \end{aligned}$$

$$E_{\lambda} - V_3 + \Delta_3$$

 $v_{F3}k_3 = \sqrt{\Delta_3^2 - (E_{\lambda} - V_3)^2 + v_{F3}^2 k_y^2},$

а константа *C* определяется из условия нормировки волновых функций (11)–(13):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\lambda}^{\dagger}(x) \Psi_{\lambda}(x) dx = 1$$

²⁾ Из приведенного равенства следует непрерывность нормальной к границе раздела компоненты тока в плоскости гетероструктуры, что является обязательным условием.

Дисперсионное уравнение, определяющее энергетический спектр носителей тока, имеет вид

$$tg(k_2d) = v_{F2}k_2f(\lambda k_y; k_1, k_3, E_{\lambda}),$$
(14)

где введена функция

$$f(\lambda k_{y}; k_{1}, k_{3}, E_{\lambda}) = [v_{F1}(k_{1} - \lambda k_{y})(E_{\lambda} - V_{3} + \Delta_{3}) + v_{F3}(k_{3} + \lambda k_{y})(E_{\lambda} - V_{1} + \Delta_{1})] \times \\ \times [E_{\lambda}(E_{\lambda} - V_{1} + \Delta_{1})(E_{\lambda} - V_{3} + \Delta_{3}) - v_{F2}v_{F3}\lambda k_{y}(k_{3} + \lambda k_{y})(E_{\lambda} - V_{1} + \Delta_{1}) + v_{F1}v_{F2}\lambda k_{y}(k_{1} - \lambda k_{y})(E_{\lambda} - V_{3} + \Delta_{3}) - \\ - v_{F1}v_{F3}(k_{1} - \lambda k_{y})(k_{3} + \lambda k_{y})E_{\lambda}]^{-1},$$

которая также зависит от k_2 . Уравнение (14) должно решаться относительно k_2 , после чего находится энергия E_{λ} .

В несимметричной квантовой яме зависимость от λ в дисперсионном соотношении (14) обусловливает расщепление по псевдоспину энергетического спектра носителей тока, при этом экстремумы дисперсионных кривых смещаются от угловых точек. Закон дисперсии обладает свойством $E_{\lambda}(k_y) \neq$ $\neq E_{-\lambda}(k_y)$, и возникает псевдоспиновое расщепление электронного спектра в экстремуме $k_y = k_{ye}^*$:

$$\delta E_s^e = |E_{-1}^e(k_{ue}^*) - E_{+1}^e(k_{ue}^*)|$$

Аналогично находится псевдоспиновое расщепление дырочного спектра в экстремуме $k_y = k_{yh}^*$:

$$\delta E_s^h = |E_{-1}^h(k_{uh}^*) - E_{+1}^h(k_{uh}^*)|.$$

Таким образом, графеновая нанополоска становится непрямым полупроводником (аналогом кремния и германия), поэтому в ней возможно образование электронно-дырочной жидкости [50]. В симметричной квантовой яме, где $\Delta_1 = \Delta_3$, $V_1 = V_3$, $v_{F1} = v_{F3}$, зависимость энергии от λ пропадает и расщепление по псевдоспину энергетического спектра носителей тока отсутствует [24].

4. РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ

Решения уравнения (14) определяют спектр размерного квантования

$$E_{\lambda b_{\mp}}(k_y) = \pm v_{F2} \sqrt{k_{2b_{\mp}}^2(\lambda k_y) + k_y^2},$$

где $b_{\mp} = 1, 2, \ldots$ нумерует ветви электронного (знак «-») и дырочного (знак «+») спектра соответственно. На рис. 5 схематично изображены спектры размерного квантования для симметричной и несимметричной квантовых ям.



Рис.5. Энергетические спектры: (a) симметричной квантовой ямы (псевдоспинового расщепления нет — ветви для $\lambda = +1$ и $\lambda = -1$ совпадают: $E_{\lambda}(k_y) = E_{-\lambda}(k_y) = E_{\lambda}(-k_y)$); (б) несимметричной квантовой ямы — есть псевдоспиновое расщепление в виде «раздвижки» экстремумов по квазиимпульсу k_{ye}^* для электронов (показано для $b_- = 1$) и k_{yh}^* для дырок (показано для $b_+ = 1$), при этом $E_{\lambda}(k_y) \neq E_{-\lambda}(k_y)$

Определим теперь эффективные массы носителей тока в нанополоске графена, возникающие за счет размерного квантования в планарной гетероструктуре. Отметим, что как в случае псевдоспинового расщепления, так и при его отсутствии, эффективные массы не зависят от четности λ . Далее для простоты будем опускать индексы b_{\mp} , подразумевая, что рассматриваем какую-то одну ветвь электронного спектра.

Закон дисперсии электронов в окрестности экстремума λk_{ue}^* представим в виде

$$E_{\lambda}^{e} \approx E_{0}^{e} + \frac{1}{2m_{e}^{*}} \left(k_{y} - \lambda k_{ye}^{*}\right)^{2},$$

$$m_{e}^{*} = \frac{1}{v_{F2}} \frac{\sqrt{k_{20e}^{2} + k_{ye}^{*2}}}{1 + k_{20e}^{'2} + k_{20e}k_{20e}^{''}},$$
(15)

где k_{20e} , k'_{20e} , k''_{20e} — значения соответственно функции $k_{2e}(k_y)$, ее первой и второй производных в экстремуме $k_y = \lambda k_{ye}^*$, которые не зависят от λ ; $E_0^e = v_{F2}\sqrt{k_{20e}^2 + k_{ye}^{*2}}$ — значение энергии в экстремуме.

Аналогичные выражения получаем для дырок:

$$E_{\lambda}^{h} \approx E_{0}^{h} - \frac{1}{2m_{h}^{*}} \left(k_{y} + \lambda k_{yh}^{*}\right)^{2},$$

$$m_{h}^{*} = \frac{1}{v_{F2}} \frac{\sqrt{k_{20h}^{2} + k_{yh}^{*2}}}{1 + k_{20h}^{'2} + k_{20h} k_{20h}^{''}},$$
(16)

где k_{20h} , k'_{20h} , k''_{20h} — значения соответственно функции $k_{2h}(k_y)$, ее первой и второй производных в экстремуме $k_y = -\lambda k_{yh}^*$; $E_0^h = -v_{F2}\sqrt{k_{20h}^2 + k_{yh}^{*2}}$.

Для оценки характерных величин рассмотрим планарную гетероструктуру, составленную из нанополоски бесщелевого графена и двух модельных щелевых модификаций графена с параметрами $\Delta_1 =$ = 0.75 эВ, $v_{F1} = 1.1v_{F2}$ и $\Delta_3 = 1$ эВ, $v_{F3} =$ = 1.2 v_{F2} . Ширина нанополоски бесщелевого графена d = 2.46 нм (10 шестиугольных ячеек). Значения V_1 и V_3 неизвестны, но их можно получить, сравнивая наши результаты с экспериментальными, поэтому нас интересуют зависимости параметров энергетического спектра от V_1 и V_3 . При этом $|V_1| \leq \Delta_1$ и $|V_3| \leq \Delta_3$, чтобы гетероструктура была типа I.

На рис. 6–9 приведены результаты численного расчета наведенных эффективных масс электрона и дырки в нанополоске графена, значений энергий в экстремумах, величин k_{xe}^* и k_{xh}^* и псевдоспинового расщепления $\delta E_s^{e,h}$ в зависимости от работы выхода одной из щелевых модификаций графена в предположении о том, что работа выхода другой равна нулю.

Из рис. 9 видно, что псевдоспиновое расщепление может составлять около 10 мэВ. Чтобы достичь большей величины псевдоспинового расщепления, необходимо иметь достаточно сильное «перекашивание» квантовой ямы. Работу выхода, V_1 и V_3 , можно изменять, прикладывая давление к областям щелевых модификаций графена, поскольку при наложении давления возможно смещение долин по энергии (смещаются потенциальные барьеры, являющиеся запрещенными зонами щелевых модификаций графена). Аналогичный эффект можно получить, прикладывая электрическое поле порядка 10⁶ В/см



Рис. 6. Зависимости наведенных эффективных масс электрона (кривые 1) и дырки (кривые 2) в нанополоске графена от V_1 при $V_3 = 0$ (*a*) и от V_3 при $V_1 = 0$ (б). Эффективные массы указаны в единицах массы m_0 свободного электрона

в плоскости гетероструктуры перпендикулярно границам раздела [40].

Как и ожидалось, при $V_1 = V_3 = 0$ энергетический спектр симметричен относительно замены $E \to -E$, т.е. электронные и дырочные спектры обладают одинаковыми наведенными эффективными массами, значениями энергии в экстремумах, положениями экстремумов и псевдоспиновыми расщеплениями. Наведенные эффективные массы электронов и дырок в графене оказываются меньше значений эффективных масс в щелевых модификациях графена ($m_1^* = \Delta_1/v_{F1}^2 \approx 0.11m_0$ и $m_3^* = \Delta_3/v_{F3}^2 \approx \approx 0.15m_0$), окружающих нанополоску бесщелевого графена.

5. ПРИГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Приграничные (краевые) состояния были предсказаны Таммом [51] в 1932 г. и интенсивно исследуются в различных системах, например, в полупроводниковых сверхрешетках [52,53]. Мы рассматриваем новый тип приграничных состояний, возникающих в ограниченном интервале квазиимпульсов





Рис.7. Зависимости значений энергии в экстремумах ветвей для электронов E_0^e (кривые 1) и для дырок $|E_0^h|$ (кривые 2) в спектре размерного квантования от V_1 при $V_3 = 0$ (*a*) и от V_3 при $V_1 = 0$ (*б*). Эффективная энергетическая щель $E_q^{eff} = E_0^e + |E_0^h| \approx 629$ мэВ слабо изменяется

при пересечении дисперсионных кривых, аналогичный возникающим в узкощелевых полупроводниковых гетероструктурах [54, 55]. В исследуемой нами планарной графеновой гетероструктуре эти состояния локализованы вблизи границ раздела графена и его щелевых модификаций. Приграничные состояния не являются спецификой квантовой ямы и могут возникать также в квантовых барьерах [10]. Отметим, что приграничные состояния возникают при пересечении дисперсионных кривых и в одиночном гетероконтакте различных модификаций графена [56].

Волновая функция приграничного состояния электрона имеет следующий вид:

при x < 0

$$\widetilde{\psi}_{\lambda}(x) = \widetilde{C} \begin{pmatrix} 1\\ \widetilde{q}_1 \end{pmatrix} \exp(\kappa_1 x),$$

где

$$\widetilde{q}_1 = -i \frac{v_{F1}(\kappa_1 - \lambda k_y)}{E_\lambda - V_1 + \Delta_1},$$



Рис. 8. Положение экстремумов ветвей размерного квантования электронов $k_y^* = k_{ye}^*$ (кривые 1) и дырок $k_y^* = k_{yh}^*$ (кривые 2) в зависимости от V_1 при $V_3 = 0$ (*a*) и от V_3 при $V_1 = 0$ (*б*). На вставках показаны взаимное расположение дисперсионных кривых при $V_1 = V_3 = 0$ (*a*) и в точках $k_{ye}^* = k_{yh}^*$ (*б*); для простоты положения K- и K'-точек совмещены

$$v_{F1}\kappa_{1} = \sqrt{\Delta_{1}^{2} - (E_{\lambda} - V_{1})^{2} + v_{F1}^{2}k_{y}^{2}};$$
2) при 0 < x < d

$$\widetilde{\psi}_{\lambda}(x) = \widetilde{C}\begin{pmatrix}\widetilde{\varkappa}_{-}\\ \widetilde{q}_{2}\widetilde{\varkappa}_{-}\end{pmatrix} \exp(-\kappa_{2}x) + \widetilde{C}\begin{pmatrix}\widetilde{\varkappa}_{+}\\ \widetilde{q}_{2}'\widetilde{\varkappa}_{+}\end{pmatrix} \exp(\kappa_{2}x),$$

где

$$\widetilde{\varkappa}_{\pm} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{v_{F1}}{v_{F2}}} \left[1 \pm \frac{\lambda k_y}{\kappa_2} \pm \frac{v_{F1}(\kappa_1 - \lambda k_y) E_{\lambda}}{v_{F2} \kappa_2 (E_{\lambda} - V_1 + \Delta_1)} \right],$$

$$\widetilde{q}_{2} = i \frac{v_{F2}(\kappa_{2} + \lambda k_{y})}{E_{\lambda}}, \quad \widetilde{q}_{2}' = -i \frac{v_{F2}(\kappa_{2} - \lambda k_{y})}{E_{\lambda}},$$
$$E_{\lambda} = \pm v_{F2} \sqrt{k_{y}^{2} - \kappa_{2}^{2}}, \quad (17)$$

плюс берется для электронов, а минус — для дырок;



Рис. 9. Зависимости псевдоспинового расщепления электронного δE_s^e (кривые 1) и дырочного δE_s^h (кривые 2) спектров от V_1 при $V_3 = 0$ (*a*) и от V_3 при $V_1 = 0$ (*б*). Обращение в нуль $\delta E_s^{e,h}$ соответствует обращению в нуль $k_{ye,h}^*$ на рис. 8, что показано на вставках рис. *a*. На вставках рис. *б* показано расположение дисперсионных кривых при совпадающих k_{ye}^* и k_{yh}^*

при x > d

$$\widetilde{\psi}_{\lambda}(x) = \widetilde{C}\begin{pmatrix} \widetilde{\zeta}\\ \widetilde{q}_{3}\widetilde{\zeta} \end{pmatrix} \exp\left[-\kappa_{3}(x-d)\right]$$

где

$$\begin{split} \widetilde{\zeta} &= \sqrt{\frac{v_{F1}}{v_{F3}}} \times \\ &\times \left[\operatorname{ch}(\kappa_2 d) + \left(\frac{\lambda k_y}{\kappa_2} + \frac{v_{F1}(\kappa_1 - \lambda k_y) E_\lambda}{v_{F2} \kappa_2 (E_\lambda - V_1 + \Delta_1)} \right) \operatorname{sh}(\kappa_2 d) \right], \\ &\qquad \widetilde{q}_3 = i \frac{v_{F3}(\kappa_3 + \lambda k_y)}{E_\lambda - V_3 + \Delta_3}, \\ &\qquad v_{F3} k_3 = \sqrt{\Delta_3^2 - (E_\lambda - V_3)^2 + v_{F3}^2 k_y^2}. \end{split}$$

Из выражения для энергии (17) видно, что условием существования приграничных состояний является неравенство³⁾ $|\kappa_2| < |k_y|.$

Нетрудно получить дисперсионное уравнение

$$\operatorname{th}(\kappa_2 d) = v_{F2} \kappa_2 f(\lambda k_y; \kappa_1, \kappa_3, E_\lambda).$$
(18)

Уравнение (18) аналогично уравнению (14), в котором сделаны замены $k_1 \to \kappa_1, k_2 \to i\kappa_2, k_3 \to \kappa_3$.

Мы провели численные расчеты зависимости энергии приграничных состояний от квазиимпульса k_y для модельных гетероструктур с $\Delta_1 = 0.75$ эВ, $\Delta_3 = 1$ эВ, $V_3 = 0$, $v_{F1} = v_{F3} = 0.7v_{F2}$ и с двумя значениями $V_1 = 0$ и $V_1 = 100$ мэВ. Результаты расчетов приведены на рис. 10 и 11. Расчет показывает, что возникают приграничные состояния только одной четности для электронов с $\lambda = +1$ и для дырок с $\lambda = -1$.

Для дырок в приграничном состоянии с $\lambda = -1$ при $V_1 = 0$ области разрешенных k_y те же, что и для электронов, но их энергии имеют противоположный знак, что соответствует симметрии спектра относительно замены $E_{\lambda} \rightarrow -E_{-\lambda}$. В случае $V_1 = 100$ мэВ эта симметрия нарушается — приграничные состояния дырок существуют только в области отрицательных квазиимпульсов.

6. ЭКСИТОН В ПЛАНАРНОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА

В бесщелевом графене эффективная масса носителей тока равна нулю, и экситоны в нем отсутствуют. Наличие экситонов в бесщелевом графене привело бы к экситонной неустойчивости и переходу его в щелевое состояние экситонного диэлектрика [57, 58].

Возникновение энергетической щели в энергетическом спектре графеновой нанополоски, описанное в разд. 4, дает возможность образования экситонов при оптическом возбуждении или при инжекции электронов и дырок. Наличие экситонов в квантовых ямах на основе графена существенно влияет на оптические свойства рассматриваемой системы.

Экситон теоретически исследовался в похожих квазиодномерных углеродных системах — нанотрубках различной конфигурации (одностеночных или многостеночных с полупроводниковым спектром) [59]. Для расчета спектра экситона в планарной квантовой яме на основе графена мы используем модель, аналогичную примененной в работе [60] для квантовых нитей. Эта модель дает простые аналитические выражения для энергии связи экситона.

Поскольку в формулах (15) и (16) подразумевается переход к нерелятивистскому пределу, при достаточно малой ширине нанополоски уравнение для

³⁾ Мы исключаем случай $|\kappa_2| = |k_y|$, поскольку нулевая мода $E_{\lambda} = 0$ отсутствует (для нее $\widetilde{\psi}_{\lambda}(x) \equiv 0$).



Рис. 10. Зависимости энергии электрона приграничного состояния с $\lambda = +1$ в гетероструктуре с параметрами $\Delta_1 = 0.75$ эВ и $\Delta_3 = 1$ эВ, $v_{F1} = v_{F3} = 0.7v_{F2}$ и $V_1 = V_3 = 0$ (приграничные состояния электронов с $\lambda = -1$ отсутствуют). Область разрешенных квазиимпульсов k_y представляет собой два отрезка в области отрицательных k_y (a) и в области положительных k_y (б)

двухчастичной волновой функции, зависящей от координат электрона y_{-} и дырки y_{+} , должно быть одномерным уравнением Шредингера с кулоновским потенциалом:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2m_e^*}\frac{\partial^2}{\partial y_-^2} - \frac{1}{2m_h^*}\frac{\partial^2}{\partial y_+^2} - \frac{\widetilde{e}^2}{|y_- - y_+|} \end{pmatrix} \times \\ \times \phi(y_-, y_+) = E'\phi(y_-, y_+), \quad (19)$$

где $E' = E - E_g^{eff}$, $\tilde{e}^2 \equiv e^2 / \kappa_{eff}$ и $\kappa_{eff} = (\varepsilon + \varepsilon')/2$ – эффективная диэлектрическая проницаемость графена, определяемая диэлектрическими проницаемостями ε и ε' сред, окружающих графен, например материала подложки и вакуума [61, 62], и может изменяться в широких пределах.

Кулоновское взаимодействие одномерных электронов и дырок в графеновой нанополоске трехмерно. Но в задаче об экситоне в достаточно узких нанополосках кулоновское взаимодействие можно считать зависящим только от продольных *у*-координат электрона и дырки.

Переходя в уравнении (19) к координате $y = y_{-} - y_{+}$ (расстояние между электроном и дыркой) и координате центра масс

$$Y = \frac{m_e^* y_- + m_h^* y_+}{m_e^* + m_h^*}$$

и вводя функцию

$$\phi(y_-, y_+) = \psi_n(y)e^{iKY},$$

где K — импульс экситона как целого, получим уравнение

$$\left(-\frac{1}{2\mu^*}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\tilde{e}^2}{|y|}\right)\psi_n(y) = E_n\psi_n(y),\tag{20}$$

12 ЖЭТФ, вып. 3

где $\mu^* = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*)$ — приведенная масса, E_n — уровни экситона, $n = 0, 1, 2, \ldots$ — главное квантовое число. Чтобы получить полную энергию E' экситона, нужно к E_n добавить кинетическую энергию движения экситона как целого, $E' = E_n + K^2/2(m_e^* + m_h^*)$.

Решим уравнение (20) для y > 0. Функцию $\psi_n(y)$ ищем в виде

$$\psi_n(y) = B_n \exp\left(-\frac{y}{a_n}\right) F_n\left(\frac{2y}{a_n}\right)$$

После ее подстановки в (20) получаем гипергеометрическое уравнение

$$\xi F_n'' - \xi F_n' + \eta F_n = 0, \qquad (21)$$

где $\xi = 2y/a_n, \ \eta = \mu^* \widetilde{e}^2 a_n.$ Также получаем соотношение

$$E_n = -\frac{1}{2\mu^* a_n^2}.$$
 (22)

Уравнение (21) имеет решение при $\eta = n$ в виде полинома Лагерра:

$$F_n(\xi) = \frac{1}{n!} \xi e^{\xi} \frac{d^n}{d\xi^n} \left(\xi^{n-1} e^{-\xi}\right) \equiv L_n^{-1}(\xi).$$

Волновая функция запишется в виде

$$\psi_n(y) = B_n \exp\left(-\frac{y}{a_n}\right) L_n^{-1}\left(\frac{2y}{a_n}\right).$$

Аналогично получаем решение уравнения (20) для y < 0:

$$\psi_n(y) = \pm B_n \exp\left(-\frac{y}{a_n}\right) L_n^{-1}\left(-\frac{2y}{a_n}\right)$$



Рис. 11. То же, что на рис. 10, но при $V_1 = 100$ мэВ, а также зависимость энергии дырки с $\lambda = -1$ на области разрешенных квазиимпульсов k_y , представляющей собой один отрезок отрицательных k_y (6)

где знак «+» для n = 0, а знак «-» для $n \neq 0$. Здесь в качестве граничных условий учтены непрерывность функции $\psi_n(y)$ и ее первой производной $\psi'_n(y)$. Для $n \neq 0$ имеем $\psi_n(0) = 0$, а $\psi'_n(0) \neq 0$, поэтому для возбужденных состояний волновая функция $\psi_n(y)$ должна быть нечетной (иначе $\psi'_n(y)$ будет разрывна в нуле). Для основного состояния, наоборот, волновая функция является четной.

Коэффициенты B_n в выражении для волновой функции $\psi_n(y)$ определяются условием нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(y)|^2 dy = 1,$$

откуда получаем

$$B_n = \left[a_n \int_{0}^{\infty} (L_n^{-1}(\xi))^2 e^{-\xi} d\xi\right]^{-1/2}$$

Тогда $B_n = 1/\sqrt{2a_n}$ для $n = 1, 2, \dots$ и $B_0 = 1/\sqrt{a_0}$ для n = 0.

Величины

$$a_n = n/\mu^* \tilde{e}^2 \tag{23}$$

при $n = 1, 2, \ldots$ — боровские радиусы возбужденных состояний. Используя формулы (22) и (23), находим энергетический спектр экситона:

$$E_n = -\mu^* \tilde{e}^4 / 2n^2. \tag{24}$$

Для основного состояния n = 0 в одномерном случае энергия кулоновского взаимодействия логарифмически расходится на малых расстояниях [63]. Поэтому необходимо учесть трехмерность кулоновского взаимодействия в виде размазанности волновой функции экситона в поперечном к границам нанополоски направлении (оси x), что сводится к введению радиуса обрезания $d_0 \leq d$. Усредним оператор кинетической энергии

$$\widehat{T} = -rac{1}{2\mu^*} rac{\partial^2}{\partial y^2}$$

и потенциал

$$V(y) = -\frac{\tilde{e}^2}{|y|}\theta\left(|y| - d_0\right)$$

по волновым функциям основного состояния

$$\psi_0(y) = \frac{1}{\sqrt{a_0}} \exp\left(-\frac{|y|}{a_0}\right),\tag{25}$$

где a_0 — вариационный параметр, имеющий смысл боровского радиуса основного состояния экситона. Для энергии E_0 основного состояния экситона получаем выражение

$$E_0 = \frac{1}{2\mu^* a_0^2} - \frac{2\tilde{e}^2}{a_0} \ln \frac{a_0}{d}.$$
 (26)

Минимизируя (26) по *a*₀, получаем уравнение для *a*₀:

$$a_0 = \frac{a_1}{2\left[\ln(a_0/d) - 1\right]},\tag{27}$$

из которого с логарифмической точностью, когда считается, что

$$\ln(a_1/d) \gg 1,\tag{28}$$

находим соотношения

$$E_0 = 4E_1 \ln^2(a_1/d), \tag{29}$$

$$a_0 = \frac{a_1}{2\ln(a_1/d)}.$$
 (30)

Используя (27), легко найти следующий поправочный член к *E*₀:

$$\delta E_0^{(1)} = -8E_1 \ln(a_1/d) \ln \left(2 \ln(a_1/d)\right).$$

Обратимся к вопросу об условиях применимости полученных формул.

Условием устойчивости полупроводникового состояния, наведенного в нанополоске графена, относительно спонтанного рождения экситонов (переход в экситонный диэлектрик) является требование того, чтобы энергия связи $|E_0|$ экситона была меньше эффективной энергетической щели в нанополоске графена,

$$|E_0| < E_g^{eff}.$$

Ширина квантовой ямы d при этом должна быть существенно меньше боровского радиуса экситона a_1 ,

 $d \ll a_1$.

Для того чтобы формула (29), полученная с логарифмической точностью, давала правильный результат, необходимо выполнение условия (28). Однако нельзя брать нанополоску графена слишком узкой, так как в несимметричной квантовой яме (мы рассматриваем такие квантовые ямы, чтобы исследовать псевдоспиновые эффекты) при малой ширине *d* может не быть ни одного уровня размерного квантования. При уменьшении *d* эффективная энергетическая щель $E_g^{e\!f\!f}$ увеличивается и стремится к $\Delta_+ + \Delta_-$, где $\Delta_{\pm} = \min\{\Delta_1 \pm V_1, \Delta_3 \pm V_3\}$ (верхний знак для электронного, нижний — для дырочного уровня размерного квантования). При некотором d_c происходит «выталкивание» уровней размерного квантования в непрерывный спектр. Это накладывает ограничение на d снизу:

$$d > d_c$$
.

Величину d_c можно оценить следующим образом:

$$d_c \approx \frac{\pi v_{F2}}{\Delta_+ + \Delta_-}$$

При большой ширине квантовой ямы *d* условие (28) нарушается. В этом случае необходимо провести более точный вариационный расчет, используя



Рис. 12. Результаты расчета энергии основного состояния экситона: кривая 1 — расчет по формуле (29), кривая 2 — расчет по формуле (31) с предварительным численным решением уравнения (32) относительно a_0 ; $d_0 = 0.22d$

модифицированный «трехмерный» кулоновский потенциал

$$\widetilde{V}(y) = -\frac{\widetilde{e}^2}{\sqrt{y^2 + d_0^2}}$$

где d_0 — параметр обрезания. Усредним гамильтониан с потенциалом $\widetilde{V}(y)$ по пробным волновым функциям (25):

$$E_0 = \frac{1}{2\mu^* a_0^2} - \frac{2\tilde{e}^2}{a_0} I(\rho), \qquad (31)$$

где $I(\rho) = \pi [H_0(\rho) - Y_0(\rho)]/2$, $H_\nu(\rho)$ и $Y_\nu(\rho)$ — соответственно функция Струве и функция Бесселя второго рода (здесь $\nu = 0$, а ниже $\nu = 1$), $\rho = 2d_0/a_0$.

Минимизируя выражение (31) по a_0 , получаем уравнение для a_0 :

$$\frac{2a_0}{a_1}I(\rho) + \frac{4d_0}{a_1}J(\rho) = 1,$$
(32)

где $J(\rho) = 1 - \pi \left[H_1(\rho) - Y_1(\rho) \right] /2.$

Нами был проведен численный расчет зависимости $E_0(d)$ обоими описанными выше способами для гетероструктуры, рассмотренной в разд. 4 (рис. 12). Параметр $d_0 \propto d$, а коэффициент пропорциональности выбирался так, чтобы при малых d результаты обоих расчетов были близки. Отклонение результатов расчета при больших d обусловлено тем, что $\ln(a_1/d)$ становится сравнимым с единицей.

7. ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА УРОВНИ ЭКСИТОНА

Оператор взаимодействия экситона с внешним постоянным электрическим полем ${\cal E}$ имеет вид

$$\hat{H}_i = -\mathbf{d}\boldsymbol{\mathcal{E}} = |\tilde{e}|(\mathcal{E}_x x + \mathcal{E}_y y),$$

где $x = x_{-} - x_{+}$ и $y = y_{-} - y_{+}$ — расстояния между электроном и дыркой по осям x и y, d — дипольный момент. Электрическое поле будем считать достаточно слабым, так что поправка к уровням энергии экситона мала не только по сравнению с расстоянием между уровнями размерного квантования, но и по сравнению с расстоянием между уровнями экситона. Это условие можно записать в виде

$$d \ll a_1 \ll a_{\mathcal{E}}$$

где $a_{\mathcal{E}} = (\mu^* | \widetilde{e} | \mathcal{E})^{-1/3}$ — электрическая длина.

Рассмотрим два случая: 1) электрическое поле направлено по оси *x* перпендикулярно границам нанополоски графена в плоскости гетероструктуры; 2) электрическое поле направлено по оси *y* параллельно границам полоски графена.

В первом случае поправка к энергии пропорциональна разности средних значений *x*-координат электрона и дырки:

$$E_{\perp\lambda\lambda'}^{(1)} = |\widetilde{e}|\mathcal{E}\left(\langle x_{-}\rangle_{\lambda} - \langle x_{+}\rangle_{\lambda'}\right), \qquad (33)$$

где средние *x*-координат вычисляются по одночастичным волновым функциям электрона и дырки и, вообще говоря, зависят от λ и λ' (собственных значений оператора \hat{P} соответственно для электрона и дырки). Поправка (33) является сдвигом уровней экситона, не зависящим от главного квантового числа *n*. Она может быть разной для разных λ и λ' , что обусловит различие в энергиях связи экситонов (всего четыре варианта для значения энергии связи экситона, образованного из электрона с $\lambda = \pm 1$ и дырки с $\lambda' = \pm 1$).

Во втором случае поправка к уровням энергии экситона первого порядка по электрическому полю равна нулю⁴):

$$E_{\parallel n}^{(1)} = |\tilde{e}| \mathcal{E} \langle y \rangle_n \equiv 0, \qquad (34)$$

поскольку интеграл по y от $y|\psi_n(y)|^2$ равен нулю. В этом случае посчитаем поправку второго поряд-

ка (квадратичный эффект по электрическому полю). Воспользуемся теорией возмущений Далгарно-Льюиса [64]. Введем эрмитов оператор \hat{F} такой, чтобы выполнялось равенство

$$[\widehat{F}, \ \widehat{H}_0]|n\rangle = \widehat{H}_i|n\rangle, \tag{35}$$

где

$$\widehat{H}_0 = -\frac{1}{2\mu^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\widetilde{e}^2}{|y|}$$

— гамильтониан нулевого приближения, $|n\rangle = \psi_n(y)$ — волновая функция нулевого приближения *n*-го уровня экситона; здесь $\hat{H}_i = |\tilde{e}|\mathcal{E}y$. Тогда поправка к энергии второго порядка равна

$$E_{\parallel n}^{(2)} = \langle n | \hat{H}_i \hat{F} | n \rangle - \langle n | \hat{H}_i | n \rangle \langle n | \hat{F} | n \rangle.$$
(36)

В нашем случае второе слагаемое в этой формуле равно нулю согласно (34).

Уравнение (35) перепишется в виде

$$\psi_n \frac{\partial^2 \widehat{F}}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial \psi_n}{\partial y} \frac{\partial \widehat{F}}{\partial y} = 2\mu^* \widehat{H}_i \psi_n.$$
(37)

Решение уравнения (37) является следующей функцией *y*:

$$\widehat{F}(y) = 2\mu^{*} \int_{-\infty}^{y} \frac{dy'}{|\psi_{n}(y')|^{2}} \times \\ \times \int_{-\infty}^{y'} dy'' \psi_{n}^{*}(y'') \widehat{H}_{i} \psi_{n}(y''). \quad (38)$$

Используя формулы (36) и (38), нетрудно получить поправку к основному состоянию экситона:

$$E_{\parallel 0}^{(2)} = -\frac{5}{128} \frac{a_1^3}{\ln^4(a_1/d)} \mathcal{E}^2, \qquad (39)$$

которая очень мала по сравнению с E_0 (29) за счет логарифма в четвертой степени в знаменателе и малого коэффициента.

Для сравнения приведем выражение для поправки к первому возбужденному уровню экситона:

$$E_{\parallel 1}^{(2)} = -\frac{3}{8}(31 - 6\gamma)a_1^3\mathcal{E}^2, \qquad (40)$$

где $\gamma = 0.577...$ — постоянная Эйлера.

Оценим величину поля ионизации, т. е. электрического поля \mathcal{E}_c , способного «разорвать» экситон. По аналогии со слоистыми гетероструктурами [65] можно сделать оценку

$$\mathcal{E}_c = \frac{|E_0|}{8|\widetilde{e}|\langle |y|\rangle_0}$$

⁴⁾ Отметим, что и в предыдущем случае при симметрии спектров электронов и дырок относительно замены $E \to -E$ будет $E_{\perp n}^{(1)} \equiv 0$, поскольку $\langle x_- \rangle_{\lambda} \equiv \langle x_+ \rangle_{\lambda'}$.

где $\langle |y| \rangle_0 = a_0/2$ — среднее расстояние между электроном и дыркой для экситона в основном состоянии. Отсюда с логарифмической точностью получаем

$$\mathcal{E}_c = \mu^{*2} |\tilde{e}|^5 \ln^3(a_1/d). \tag{41}$$

Чтобы продемонстрировать, каков порядок величины \mathcal{E}_c , обратимся к примеру квантовой ямы, рассмотренному в разд. 4. Возьмем эффективные массы электрона и дырки одинаковыми, $m_e^* = m_h^* \approx 0.0056m_0$, эффективную диэлектрическую проницаемость для подложки SiO₂ $\kappa_{eff} \approx 5$, d = 2.46 нм и $a_1 \approx 81$ нм, тогда по формуле (41) получаем $\mathcal{E}_c = 9 \text{ кB/см.}$

8. ВОЗМОЖНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ РАССМОТРЕННОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

Псевдоспиновое расщепление энергетического спектра можно наблюдать с помощью рамановской спектроскопии. Нас интересует D'-пик (в некоторых статьях его называют 2D-пиком, тем самым подчеркивая, что он относится к рамановскому спектру второго порядка). Этот пик в рамановскому спектру ворого порядка). Этот пик в рамановском спектре бесщелевого графена находится при 2700 см⁻¹ [66]. В D'-пик дают вклад процессы междолинного рассеяния с участием фононов с волновым вектором q > K, где $K = 4\pi/3\sqrt{3}a \approx 1.7 \cdot 10^8$ см⁻¹ — расстояние между соседними K- и K'-точками. Один из таких процессов $A \to B \to C \to D \to A$ показан на рис. 13.

При наличии псевдоспинового расщепления энергетического спектра возможны процессы



Рис.13. Возможные двойные резонансные рамановские процессы, идущие с перебросом электрона (дырки) между долинами. Для краткости не показаны аналогичные процессы с перебросом дырки между долинами

междолинного рассеяния с участием фононов с волновым вектором $q' \approx q \mp \Delta k$ (минус для электронов, плюс для дырок), где $\Delta k = 2k_{ye}^*$ в процессах рассеяния электронов и $\Delta k = 2k_{yh}^*$ в процессах рассеяния дырок. Они дают вклад как в пик, смещенный на $\Delta \omega_R^{(+)}$ от положения D'-пика в сторону больших частот, так и в пик, смещенный на $\Delta \omega_R^{(-)}$ от положения D'-пика в сторону меньших частот. Таким образом, D'-пик расщеплен на два пика.

Величину $\Delta \omega_R$ можно оценить исходя из закона дисперсии оптических фононов $\omega_{ph}(q)$. Рамановский сдвиг определяется удвоенной частотой оптического фонона:

$$\delta\omega_R(q) = 2\omega_{ph}(q).$$

Изменение рамановского сдвига, вызванное псевдоспиновым расщеплением, составляет

$$\Delta \omega_R^{(\pm)} \approx |\delta \omega_R(K \mp \Delta k) - \delta \omega_R(K)|.$$

Оценки показывают, что $\Delta \omega_R \approx 24 \text{ см}^{-1}$ при характерных значениях параметров гетероструктуры. Это значительно превосходит спектральное разрешение 1 см⁻¹ [67] и сравнимо с шириной *D'*-пика бесщелевого графена, $\Gamma_0 = 30 \text{ см}^{-1}$ [68, 69].

Отметим, что смещение D'-пика в сторону больших частот наблюдалось также в рамановском спектре щелевого графена, эпитаксиально выращенного на подложке SiC [67]. Этот эффект объясняется наличием сильного растягивающего напряжения, которое оказывает подложка на свободный эпитаксиальный графен (постоянная решетки SiC существенно превосходит постоянную решетки графена).

Для того чтобы избежать появления вкладов рамановского рассеяния от щелевых модификаций графена, необходимо либо брать диаметр лазерного пучка меньше ширины нанополоски бесщелевого графена ($d \leq 10$ нм), либо использовать излучение с такой частотой ω , которая не может поглощаться в щелевых модификациях графена,

$$E_q^{eff} + 2\omega_{ph} < \omega < \min\{2\Delta_1, 2\Delta_3\}.$$

Положения линий люминесценции, соответствующих уровням экситона, получаются из оптических экспериментов. Тем самым можно сравнить наблюдаемые значения энергии связи экситона с теоретическими. В электрическом поле, приложенном в плоскости гетероструктуры перпендикулярно ее границам раздела, экситонные линии могут расщепляться, и величина расщепления определяется формулой (33).

Рассмотрим квантование Ландау для носителей тока в графеновой планарной гетероструктуре в магнитном поле, приложенном перпендикулярно к ней. Мы считаем квантующее магнитное поле не очень сильным,

$$a_H = \sqrt{c/|e|H} \gg d,$$

т.е. определяющим является размерное квантование.

Как и в случае слоистых узкощелевых гетероструктур, для учета магнитного поля квазиимпульс k_y свободного движения в спектре размерного квантования (15) и (16) заменим на квантованный магнитный импульс [38,70]

$$k_{Hn} = \sqrt{2n}/a_H,$$

где $n = 0, 1, 2, \ldots$ нумерует уровни Ландау (для каждого уровня размерного квантования свой набор уровней Ландау; здесь мы ограничимся низшим уровнем размерного квантования). Тогда для энергии носителей тока имеем

$$E_{n\lambda}^{e} = E_{0}^{e} + \omega_{c}^{e} \left(\sqrt{n} - \lambda \sqrt{n_{He}}\right)^{2},$$
$$E_{n\lambda}^{h} = E_{0}^{h} - \omega_{c}^{h} \left(\sqrt{n} + \lambda \sqrt{n_{Hh}}\right)^{2},$$

где $\omega_c^{e,h} = |e|H/m_{e,h}^*c$ — циклотронная частота, $n_{He,h} = a_H^2 k_{ye,h}^{*2}/2.$

Минимуму энергии $|E_{n\lambda}^{e,h}|$ электронов с $\lambda = +1$ (вблизи *К*-точки) или дырок с $\lambda = -1$ (вблизи *К'*-точки) может соответствовать уровень Ландау $n \neq 0$. Нулевой уровень Ландау является низшим, только если $n_{He,h} < 1/4$. В случае выполнения двойного неравенства

$$N_{n-1} < n_{He,h} < N_n,$$

где $N_n = (\sqrt{n+1} + \sqrt{n})^2 / 4$, минимум энергии (основное состояние) приходится на уровень Ландау с номером n.

Для наблюдения указанного необычного основного состояния необходима достаточно низкая температура такая, чтобы энергия возбуждения с низшего уровня Ландау на ближайший уровень Ландау соответствовала условию $\Delta E_{H}^{e,h} > T$. Легко заметить, что $\Delta E_{H}^{e,h}$ как функция $n_{He,h}$ имеет миниму-



Рис.14. Энергия возбуждения $\Delta E_{H}^{e,h}$ как функция $n_{He,h}$. На вставке изображено положение уровней Ландау при $N_1 < n_{He,h} < N_2$

мы для $n_{Hmin} = N_n (n = 0, 1, 2, ...)$ и максимумы для $n_{Hmax} = \left(\sqrt{n+1} + \sqrt{n-1}\right)^2 / 4 (n = 1, 2, ...)$:

$$\Delta E_{H}^{e,h} = \begin{cases} \omega_{c}^{e,h} \left[\left(\sqrt{n-1} - \sqrt{n_{He,h}} \right)^{2} - \left(\sqrt{n} - \sqrt{n_{He,h}} \right)^{2} \right], \\ N_{n-1} < n_{He,h} < n_{Hmax}, \\ \omega_{c}^{e,h} \left[\left(\sqrt{n+1} - \sqrt{n_{He,h}} \right)^{2} - \left(\sqrt{n} - \sqrt{n_{He,h}} \right)^{2} \right], \\ n_{Hmax} < n_{He,h} < N_{n}. \end{cases}$$

Вырождение основного состояния соответствует нулевой энергии возбуждения. На рис. 14 отложена энергия возбуждения $\Delta E_H^{e,h}$ как функция $n_{He,h}$.

Наконец, наличие приграничных состояний можно обнаружить, исследуя вольт-амперную характеристику рассматриваемой планарной гетероструктуры при протекании тока вдоль нанополоски бесщелевого графена. При увеличении приложенного электрического поля носители тока могут «выпадать» в приграничные состояния (это энергетически выгодно), что может привести к появлению в вольт-амперной характеристике участка с отрицательной дифференциальной проводимостью.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы рассмотрели свойства графеновых планарных гетероструктур (квантовых ям), в которых, с одной стороны, сохраняются уникальные свойства неограниченных графеновых пленок, а с другой стороны, открывается энергетическая щель, которая делает их важным объектом углеродной наноэлектроники, позволяя эффективно управлять движением электронов.

Параметрами графеновых квантовых ям легко управлять, изменяя ширину нанополоски бесщелевого графена или ограничивающие ее щелевые модификации графена (квантовые барьеры). Мы предсказываем наличие в несимметричных графеновых квантовых ямах псевдоспинового расщепления энергетического спектра и приграничных состояний, возникающих при пересечении энергетических спектров щелевых модификаций.

Проведенные нами расчеты позволяют определить оптические свойства планарных графеновых наноструктур. Нами указаны возможные экспериментальные исследования рассмотренных эффектов.

Для упрощения исследования псевдоспиновых (долинных) свойств рассмотренной гетероструктуры удобно использовать эффективный гамильтониан, обладающий расщепленным по псевдоспину энергетическим спектром. Отметим, что такой спектр аналогичен спектру, рассмотренному Бычковым и Рашбой [71,72]. Поэтому эффективный гамильтониан должен содержать член, аналогичный спин-орбитальному члену Рашбы, который в нашем случае запишется в виде $\hat{H}_R = \alpha_R [\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\nu}$, где $\alpha_R - \boldsymbol{\sigma}$ параметр Рашбы, *v* — единичный вектор нормали к границе гетероструктуры в плоскости нанополоски бесщелевого графена. Подобный член ответствен за псевдоспиновое расщепление энергетического спектра. Для принятой в данной статье ориентации координатных осей можно использовать эффективные гамильтонианы для электронов,

$$\widehat{H}_{eff}^{e} = \frac{\widehat{p}_{y}^{2}}{2m_{e}^{*}} - \lambda \alpha_{Re} \sigma_{z} \widehat{p}_{y} + \Delta_{e},$$

и дырок,

$$\widehat{H}^{h}_{eff} = \frac{\widehat{p}^{2}_{y}}{2m_{h}^{*}} + \lambda \alpha_{Rh} \sigma_{z} \widehat{p}_{y} + \Delta_{h},$$

где $\alpha_{Re} = k_{ye}^*/m_e^*$ и $\alpha_{Rh} = k_{yh}^*/m_h^*$ — псевдоспиновые параметры Рашбы соответственно электрона и дырки (в случае отсутствия симметрии энергетического спектра размерного квантования относительно замены $E \rightarrow -E$ параметры Рашбы для электрона и дырки разные), $\Delta_{e,h}$ — параметры, связанные со значениями энергии в экстремумах дисперсионных кривых и параметрами Рашбы соотношениями

$$\Delta_e = E_0^e + \frac{1}{2}m_e^*\alpha_{Re}^2,$$

$$\Delta_h = -E_0^h + \frac{1}{2}m_h^*\alpha_{Rh}^2.$$

При характерных значениях параметров рассматриваемой гетероструктуры оценки дают $\alpha_{Re,h} \approx 5 \cdot 10^{-8}$ эВ·см, что на два порядка больше (главным образом за счет малой эффективной массы), чем у GaAs [71].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке фонда «Династия», Учебно-научного комплекса ФИАН и Целевой программы Президиума РАН поддержки молодых ученых.

ЛИТЕРАТУРА

- K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Science **306**, 666 (2004).
- K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., Nature 438, 197 (2005).
- Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature 438, 201 (2005).
- S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson et al., Phys. Rev. Lett. 100, 016602 (2008).
- X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, Nat. Nanotech. 3, 491 (2008).
- L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 73, 235411 (2006).
- L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 75, 125434 (2007).
- Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. 97, 216803 (2006).
- R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London (1998).
- 10. T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 777 (2005).
- X. Wang, Y. Ouyang, X. Li et al., Phys. Rev. Lett. 100, 206803 (2008).
- L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson et al., Science **320**, 356 (2008).
- G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks et al., Phys. Rev. B 76, 073103 (2007).
- 14. A. Mattausch and O. Pankratov, Phys. Rev. Lett. 99, 076802 (2007).
- 15. S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov et al., Nature Mater. 6, 770 (2007).

- 16. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin et al., Science 323, 610 (2009).
- 17. S. Lebègue, M. Klintenberg, O. Eriksson, and M. I. Katsnelson, Phys. Rev. B 79, 245117 (2009).
- I. Zanella, S. Guerini, S. B. Fagan et al., Phys. Rev. B 77, 073404 (2008).
- S. Marchini, S. Günther, and J. Witterlin, Phys. Rev. B 76, 075429 (2007).
- 20. D. Martoccia, P. R. Willmon, T. Brugger et al., Phys. Rev. Lett. 101, 126102 (2008).
- 21. I. Pletikosić, M. Kralj, P. Pervan et al., Phys. Rev. Lett. 102, 056808 (2009).
- 22. M. Y. Han, B. Özyilmaz, Y. Zhang, and P. Kim, Phys. Rev. Lett. 98, 206805 (2007).
- 23. Л. Е. Воробьев, Е. Л. Ивченко, Д. А. Фирсов, В. А. Шалыгин, Оптические свойства наноструктур, Наука, Санкт-Петербург (2001).
- 24. П. В. Ратников, А. П. Силин, Кратк. сообщ. по физике ФИАН вып. 2, 11 (2009).
- **25**. Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, ФТП **26**, 329 (1992).
- **26**. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестеций, Квантовая электродинамика, Наука, Москва (1969).
- 27. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al., Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009).
- **28**. Ю. Е. Лозовик, С. П. Меркулова, А. А. Соколик, УФН **178**, 757 (2008).
- 29. С. Швебер, Введение в релятивистскую квантовую теорию поля, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
- 30. А. М. Цвелик, Применение квантовой теории поля в физике конденсированного состояния, Физматлит, Москва (2002).
- 31. T. W. Appelquist, M. Bowick, D. Karabali, and L. C. R. Wijewardhana, Phys. Rev. D 33, 3704 (1986).
- 32. Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов, УФН 65, 799 (1995).
- 33. А. В. Колесников, А. П. Силин, ЖЭТФ 109, 2125 (1996).
- 34. A. V. Kolesnikov and A. P. Silin, J. Phys.: Condens. Matter 9, 10929 (1997).
- **35**. А. П. Силин, С. В. Шубенков, ФТТ **40**, 1345 (1998).
- 36. E. A. Andryushin, Sh. U. Nutsalov, and A. P. Silin, Phys. Low-Dim. Struct. 7/8, 85 (1999).

- 37. Е. А. Андрюшин, С. А. Верещагин, А. П. Силин, Кратк. сообщ. по физике ФИАН вып. 6, 21 (1999).
- E. A. Andryushin, A. P. Silin, and S. A. Vereshchagin, Phys. Low-Dim. Struct. 3/4, 85 (2000).
- **39**. Е. А. Андрюшин, Ш. У. Нуцалов, А. П. Силин, Кратк. сообщ. по физике ФИАН вып. 3, 3 (2001).
- 40. П. В. Ратников, А. П. Силин, Кратк. сообщ. по физике ФИАН вып. 11, 22 (2005).
- 41. A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, Nature Phys. 3, 172 (2007).
- 42. J. Tworzydło, I. Snyman, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B 76, 035411 (2007).
- 43. A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. 98, 157003 (2007).
- 44. D. Xiao, W. Yao, and Q. Niu, Phys. Rev. Lett. 93, 236809 (2007).
- 45. Z. Z. Zhang, K. Chang, and K. S. Chan, Appl. Phys. Lett. 93, 062106 (2008).
- J. L. Carcia-Pomar, A. Cortijo, and M. Nieto-Vesperinas, Phys. Rev. Lett. 100, 236801 (2008).
- 47. J. M. Pereira Jr., F. M. Peeters, R. N. Costa Filho, and G. A. Farias, J. Phys.: Condens. Matter 21, 045301 (2009).
- 48. G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. 53, 2449 (1984).
- 49. D. A. Abanin, P. A. Lee, and L. S. Levitov, Phys. Rev. Lett. 96, 176803 (2006).
- 50. Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс, Г. Томас, Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках, Мир, Москва (1980).
- 51. I. E. Tamm, Phys. Z. Sowjetunion 1, 733 (1932).
- **52**. С. Г. Тиходеев, Письма в ЖЭТФ **53**, 162 (1991).
- 53. S. G. Tikhodeev, Sol. St. Comm. 78, 339 (1991).
- 54. A. V. Kolesnikov, R. Lipperheide, A. P. Silin, and U. Wille, Europhys. Lett. 43, 331 (1998).
- E. A. Andryushin, A. P. Silin, and S. A. Vereshchagin, Phys. Low-Dim. Struct. 3/4, 79 (2000).
- **56**. П. В. Ратников, А. П. Силин, ФТТ **52**, 1639 (2010).
- 57. A. A. Abrikosov, J. Low Temp. Phys. 2, 37 (1970).
- **58**. С. А. Бразовский, ЖЭТФ **62**, 820 (1972).
- 59. T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. 66, 1066 (1997).

600

- 60. В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш, А. П. Силин, ФТТ
 22, 1238 (1980).
- 61. Yu. E. Lozovik and V. I. Yudson, Phys. Lett. A 56, 393 (1976).
- **62**. Л. В. Келдыш, Письма в ЖЭТФ **29**, 716 (1979).
- 63. R. Loudon, Amer. J. Phys. 27, 649 (1959).
- 64. A. Dalgarno and J. T. Lewis, Proc. Roy Soc. London A 233, 70 (1955).
- 65. D. A. B. Miller, D. C. Chemla, T. C. Damen et al., Phys. Rev. Lett. 53, 2173 (1984).
- 66. D. Graf, F. Molitor, K. Ensslin et al., Nano Lett. 7, 238 (2007).

- 67. Z. H. Ni, W. Chen, X. F. Fan et al., Phys. Rev. B 77, 115416 (2008).
- 68. A. C. Ferrari, J. C. Meyer, V. Scardaci et al., Phys. Rev. Lett. 97, 187401 (2006).
- 69. I. Calizo, A. A. Balandin, W. Bao et al., Nano Lett. 7, 2645 (2007).
- 70. A. P. Silin and S. A. Vereshchagin, Phys. Low-Dim. Struct. 9/10, 115 (2001).
- 71. Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба, Письма в ЖЭТФ 39, 66 (1984).
- 72. Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C 17, 6039 (1984).