

Фролова Елена Владимировна

**Динамика волновых пакетов
в низкоразмерных полупроводниковых структурах и в
графене**

(01.04.07 – физика конденсированного состояния)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород - 2010

Работа выполнена на кафедре теоретической физики физического факультета ГОУ ВПО «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

Научный руководитель

доктор физико-математических наук,
профессор *Демиховский Валерий Яковлевич*

Официальные оппоненты

доктор физико-математических наук
Фраерман Андрей Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор *Протогенов Александр Павлович*

Ведущая организация

Институт физики полупроводников Сибирского отд. РАН,
г. Новосибирск

Защита состоится «__» _____ 2010г. в «__» часов на заседании диссертационного совета Д212.166.01 при государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского» по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3 (НИФТИ).

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Автореферат разослан «__» _____ 2010г.

Отзывы направлять по адресу:
603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3, физический факультет ННГУ

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор

А.И. Машин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы

Изучение динамики волновых пакетов в низкоразмерных полупроводниковых структурах является актуальной проблемой физики конденсированного состояния, поскольку обнаруженные в ходе исследований эффекты должны определять динамику элементарных частиц, и, как следствие, основные характеристики и параметры приборов спиновой электроники, а так же приборов, построенных на графене. При этом основное влияние на характер эволюции волновых пакетов оказывают их начальные характеристики. В частности, обнаруженный в работе эффект расщепления с течением времени волновых пакетов обусловлен не только их начальным импульсом, но, в большей степени, исходной спиновой (псевдоспиновой) ориентацией. В связи с этим уже нельзя говорить о локализованных в пространстве состояниях заряженных частиц, как мы это делаем в случае описания пространственно-временной эволюции квантово-механической бесспиновой частицы. Кроме того, динамика волновых пакетов сопровождается важным явлением, которое названо немецким словом *Zitterbewegung*. Явление *Zitterbewegung* (ZB) было предсказано Шредингером [1,2] для свободных электронов в вакууме еще 80 лет тому назад, однако экспериментально было подтверждено только в начале 2010 года [3]. *Zitterbewegung* заключается в эффекте “дрожания” центра волнового пакета в отсутствие какого-либо внешнего поля. Эти осцилляции связаны с интерференцией положительной и отрицательной ветвей стационарного спектра, присутствующих в данном квантовом состоянии. При этом частота ZB определяется шириной запрещенной зоны между этими состояниями, а амплитуда осцилляций имеет порядок комптоновской длины волны. Как было замечено выше, в данной работе исследуются не только явление осцилляторного движения центра волновых пакетов, но и пространственно-временная эволюция плотностей вероятности в различных структурах с двухзонным спектром, а именно: в системе двумерного электронного газа со спин-орбитальным (СО) взаимодействием Рашбы, в структуре монослойного графена, в изотропной модели Латтинжера в системе дырок с эффективным спином, равным $3/2$. Также в работе рассматривается временная эволюция, и, в частности, динамика центра дираковских релятивистских трехмерных гауссовских волновых пакетов с различной начальной спиновой поляризацией. Кроме того, в работе было уделено внимание и спиновой динамике пакетов. Полученные результаты будут полезными при анализе функционирования различных спинтронных приборов, таких как, например, спиновый полевой транзистор Датты и Даса [4,5], или электронных устройств, построенных на графене [6]. Разумеется, эти результаты

необходимы и для понимания транспортных процессов и спиновой динамики в материалах со СО взаимодействием и в графене.

Полученные результаты могут быть использованы также при анализе электронного транспорта и оптики не только в полупроводниковых структурах, но и в композитных структурах типа тяжелый металл – полупроводник и тяжелый металл – благородный металл (Co, W/ Cu, Au) с гигантским спин-орбитальным взаимодействием. В подобных системах наблюдается, например, интересный эффект осцилляции магнитосопротивления при изменении толщины слоя немагнитного металла (см., например, [7]). В настоящее время этот эффект широко применяется в разработке устройств для записи и считывании информации.

Общеизвестно, что спин-орбитальное взаимодействие определяет ряд фундаментальных эффектов в атомной физике и физике твердого тела. Это релятивистский эффект связанный с тем, что в системе координат, в которой электрон покоится, на его собственный магнитный момент действует магнитное поле движущихся ядер. Взаимодействие спиновой и орбитальной степеней свободы порождает многочисленные идеи о том, как использовать транспорт спин-поляризованных частиц в приборах спиновой электроники, или спинтроники [8]. В свете последнего многочисленные работы были посвящены изучению эффектов спин-орбитального воздействия на транспортные свойства частиц в наноструктурах [9-12].

Впервые нестандартная динамика электронных волновых пакетов изучалась в релятивистской физике. Было показано, что даже в отсутствие внешних сил релятивистский пакет движется неравномерно. При этом координата его центра осциллирует. Теоретически этот эффект исследовался в работе [13], где было показано, что *Zitterbewegung* дираковских электронов имеет затухающий характер, т.е. осцилляции исчезают с течением времени. Временная эволюция релятивистских электронных одномерных волновых пакетов в вакууме с различными начальными спиновыми поляризациями и различной пространственной симметрией исследовалась в работе [14] с помощью численного расчета.

Динамика электронных волновых пакетов и явление *Zitterbewegung* свободных электронов (т.е. в отсутствии электрического или магнитного полей) в полупроводниковых квантовых ямах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и Дрессельхауза [15], впервые рассматривалась в работах Schliemann *et al.* [16,17]. Авторы этих работ изучали распространение электронов в квантовой проволоке, и показали, что осцилляторное движение удобно наблюдать в условиях, когда расплывание пакета в поперечном направлении ограничено параболическим потенциалом. Для этого решались

гейзенберговские уравнения движения для координаты и импульса, и затем, для начального гауссовского волнового пакета с различными спиновыми ориентациями определялась траектория движения центра. Однако в этих работах не рассматривалась временная эволюция пространственного распределения полной электронной плотности, как это впоследствии было сделано в нашей работе [18].

ZB легких и тяжелых дырок в трехмерных полупроводниках рассматривался в [19]. В этой работе в модели Латтинжера изучалось квазиклассическое движение дырок в присутствии постоянного электрического поля с помощью численного решения гейзенберговских уравнений для импульса и спиновых операторов. Было показано, что траектории движения содержат высокочастотные осцилляции, напоминающие *Zitterbewegung* релятивистских электронов. Впоследствии пространственное распределение 3D волновых пакетов и их изменение с течением времени рассматривалось в работе [20]. В то же время расщепление спин-поляризованных пучков в системах со спин-орбитальным взаимодействием исследуются в ряде работ. Например, авторы [21,22] предложили использовать пространство между двумя воротами в двумерной гетероструктуре с различными константами спин-орбитального взаимодействия для поляризации электронов. Было показано теоретически, что в такой структуре, пучки расщепляются на несколько спин-поляризованных компонент, распространяющихся под разными углами. Эффекты, рассмотренные в [21,22] наблюдались экспериментально в [23-25]. Универсальность явления ZB было продемонстрировано авторами работ [26] и [27] при анализе гамильтонианов различных систем с двумя ветвями энергетического спектра (например Дирака, СО взаимодействия Рашбы, Латтинжера) как в присутствии перпендикулярного магнитного поля, так без него.

В работе Schliemann [28] было исследовано изменение классической циклотронной орбиты вследствие влияния спин-орбитального взаимодействия. Было показано, что центр волнового пакета движется по более или менее устойчивым спиральным траекториям, форма которых зависит от начальной спиновой ориентации. Для этого были проведены вычисления средних значений координат центра волнового пакета $\bar{x}(t)$ и $\bar{y}(t)$ для отрезка времени, равного пяти - шести циклотронным периодам. Кроме того, в этой работе было показано, что в рассматриваемой системе электронная динамика не может адекватно описываться с помощью квазиклассического приближения.

В последние годы возрос интерес к изучению различных модификаций углерода, таких как графен и углеродные нанотрубки [29-33], в связи с большими потенциальными возможностями применения этих материалов в электронике. При этом графен – двумерная структура, имеющая гексагональную кристаллическую решетку, играет

важную роль, т.к. является основой для понимания электронных свойств других модификаций углерода. Динамика волновых пакетов в структурах монослойного и двухслойного графена рассматривалась в работах [34,35]. Было показано, что для пакета с конкретной поляризацией псевдоспина $(1 \ 0)^T$, ZB имеет затухающий характер вследствие того, что части волнового пакета соответствующие положительным и отрицательным энергиям электрона, движутся в противоположных направлениях, таким образом, что их перекрытие уменьшается с течением времени. Следует отметить, что в упомянутых выше работах не изучалась пространственно-временная эволюция электронной плотности. Изменение с течением времени формы электронных пакетов, имеющих различную начальную поляризацию псевдоспина, а также особенности ZB в монослойном графене подробно исследовались в работе [36].

Проблема генерации волновых пакетов, а также возможные методы экспериментального наблюдения *Zitterbewegung* и других проявлений квантовой механики электронов уже много лет обсуждается в физике конденсированного состояния. Так, в вышеупомянутой работе [34] для наблюдения ZB было предложено использовать технику, применявшуюся ранее для наблюдения блоховских электронных осцилляций в сверхрешетках, находящихся в электрическом поле. В работе [35] был предложен эксперимент по наблюдению ZB в графене, находящемся в магнитном поле, в котором возбуждение электронов происходит с помощью фемтосекундного лазерного импульса. В работе [37] было показано, что с помощью лазерного импульса конечного размера можно возбудить электронно-дырочные волновые пакеты в окрестности точки $\vec{k}_0 = 0$, которые впоследствии возможно разделить коротким импульсом электрического поля.

Цели и задачи работы

Целью работы является изучение особенностей квантовых состояний и динамики 2D и 3D волновых пакетов с различными ориентациями спина (псевдоспина) в полупроводниках, низкоразмерных полупроводниковых структурах и в структуре монослойного графена. В связи с этим в работе решаются следующие задачи:

1. Проводится расчет матричных функций Грина для различных двухзонных систем.
2. Исходя из вида гамильтониана рассматриваемой системы, определяются соответствующие интегралы движения, и, как следствие, свойства пространственной симметрии волновых пакетов для произвольного момента времени.

3. Находятся выражения для компонент волновой функции, как в координатном представлении, так и в импульсном пространстве.
4. В импульсном представлении проводится расчет зависимости от времени координат центра волнового пакета.
5. Исходя из полученных результатов, проводится анализ пространственно-временной эволюции волновых пакетов, а также динамики их центра; для различных параметров начального состояния определяются условия наблюдения расщепления волновых пакетов, а также направление и основные характеристики *Zitterbewegung*.
6. Для различных начальных условий проводится расчет пространственного распределения компонент спиновых плотностей, а также анализ особенностей спиновой динамики (прецессии).

Научная новизна диссертации

В работе впервые изучается пространственно-временная эволюция 2D и 3D электронных и дырочных волновых пакетов в системах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, в полупроводниках с тяжелыми и легкими дырками, описываемыми гамильтонианом Латтинжера и в графене. Показано, что пространственная и спиновая симметрии начального волнового пакета определяют ряд интегралов движения, характеризующих динамику волнового пакета и форму траектории его центра. Так же в работе исследуется зависимость основных характеристик явления *Zitterbewegung* (амплитуды, частоты, характерного время затухания и направления осцилляций) в зависимости от начальной ориентации спина, или псевдоспина в случае монослойного графена. В работе показано, что расщепление волновых пакетов на несколько частей происходит вследствие присутствия состояний, принадлежащих различным ветвям спектра, которые распространяются с разными групповыми скоростями. Эти части расщепившегося пакета могут характеризоваться различными спиновыми плотностями при рассмотрении 2D электронного газа со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. В случае же дырочной модели Латтинжера пространственное распределение компонент углового момента может иметь более сложную мультипольную структуру, а спиновая прецессия при этом имеет затухающий характер. Кроме того, в работе проанализирована зависимость характерных параметров универсального эффекта ZB не только от начальной ориентации спина (псевдоспина), но и от величины произведения начальных квазиимпульса и ширины волнового пакета.

Также в работе исследована нетипичная циклотронная динамика волнового пакета в перпендикулярном магнитном поле. Показано, что вследствие спин-орбитального взаимодействия волновой пакет со спином, параллельным магнитному полю расщепляется на две части, которые вращаются по циклотронной орбите, и после этого возвращаются (многократно) в свое первоначальное состояние. С течением времени вследствие несоразмерности циклотронных частот и пакетного расплывания, электронная плотность распределяется по всей циклотронной орбите.

Практическая значимость

Результаты, изложенные в данной работе, являются оригинальными и важными для изучения транспортных свойств и спиновой динамики частиц, описываемых многокомпонентными волновыми функциями. Кроме того, полученные результаты будут полезными при анализе функционирования различных приборов спиновой электроники (таких как спиновый полевой транзистор, спиновый клапан и др.), а также электронных устройств, построенных на графене.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Аналитически и численно найдены электронные плотности, временные зависимости координат центра волновых пакетов, а так же пространственные распределения спиновых плотностей в системах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, в полупроводниках, описываемых изотропной моделью Латтинжера и в монослойном графене.
2. Установлено, что пространственная и спиновая симметрии начального волнового пакета определяют ряд интегралов движения, характеризующих пространственно-временную эволюцию.
3. Показано, что во всех рассмотренных системах начальная ориентация спина (псевдоспина) определяет направление осцилляций, или *Zitterbewegung*, а основные характеристики ZB (амплитуда, частота и характерное время затухания) зависят от произведения начального квазиимпульса и ширины исходного волнового пакета.
4. Распространяющиеся волновые пакеты являются спин-поляризованными в системе двумерного электронного газа со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы, а в модели Латтинжера пространственные распределения компонент углового момента могут иметь сложную мультипольную структуру.
5. Показано, что в системе с СО взаимодействием, находящейся в перпендикулярном магнитном поле, начальное локализованное состояние распадается на две части,

движущиеся с различными циклотронными частотами. В определенные моменты времени распавшийся пакет восстанавливается, однако с течением времени вследствие эффекта дисперсии через несколько циклотронных периодов первоначальная электронная плотность распределится по всей орбите. Рассмотренные особенности циклотронной динамики в системах со спин-орбитальным взаимодействием должны сказаться на форме линии, а также других характеристиках циклотронного резонанса.

Личный вклад автора

Численные результаты, а так же аналитические вычисления, представленные в работе, получены соискателем лично, либо в соавторстве при его непосредственном участии. Автор диссертации принимал участие в обсуждении результатов и в подготовке работ к печати.

Апробация результатов

По результатам исследований, отраженных в диссертации, опубликовано 20 научных работ. Основные положения и результаты докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. Международные симпозиумы “Нанозифика и нанозлектроника” (г. Н. Новгород, 2007-2009гг.)
2. Первый и второй международные, междисциплинарные симпозиумы “Среды со структурным и магнитным упорядочением” (г. Ростов-на-Дону, 5-10 сентября 2007г., 23-28 сентября 2009г.).
3. Международный симпозиум “Физика низкоразмерных систем” (г. Ростов-на-Дону, 5-9 сентября 2008г.).
4. Третья Всероссийская школа молодых ученых “Микро-, нанотехнологии и их применение” (г. Черноголовка, 18-19 ноября 2008г.).
5. XII-XV Нижегородские сессии молодых ученых (2007-2010гг.).

Публикации

По результатам исследований, вошедших в диссертацию, опубликовано 20 научных работ, из них 7 статей в журналах из списка ВАК, 1 в электронном архиве, а также 12 работ в сборниках трудов и тезисов конференций разного уровня. Полный список публикаций приведен в конце автореферата.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из Введения, трех глав, Заключения, двух Приложений и списка цитируемой литературы, включающего 81 наименование. Общий объём диссертации составляет 128 страниц, включая 43 рисунка.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** обсуждается актуальность работы, формулируются её цели и положения, выносимые на защиту. Обсуждаются методы и подходы к решению поставленных задач, описывается новизна, практическая значимость и апробация работы.

В **первой главе** рассматривается динамика квазиодномерных и двумерных электронных волновых пакетов с различной поляризацией спина в A_3B_5 квантовых ямах в присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы. Гамильтониан такой системы выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \alpha(\hat{p}_y \sigma_x - \hat{p}_x \sigma_y), \quad (1)$$

где m - эффективная масса электрона, α - константа спин-орбитального взаимодействия, $\vec{\sigma}$ - матрица Паули. Собственные функции данной задачи:

$$\phi_{ps}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2\pi\hbar} \exp(i \frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}) \begin{pmatrix} 1 \\ -is \exp(i\varphi) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

определяются квантовыми числами $\vec{p}(p_x, p_y)$ и индексом энергетической ветви $s = \pm 1$ (φ - угол между направлением импульса и осью x). Для анализа временной эволюции электронного волнового пакета используется метод функцией Грина. Для этого определяются выражения для матричных элементов функции Грина и затем, задавая начальную форму волнового пакета, мы находим компоненты волновой функции в произвольный момент времени. Например, в случае исходного волнового пакета с координатной частью $f(\vec{r})$ и ориентацией спина вдоль оси z , компоненты спинора находятся следующим образом $(\psi_1, \psi_2)^T = \int d\vec{r}' (G_{11} f(\vec{r}'), G_{12} f(\vec{r}'))^T$, где

$$G_{11}(\vec{r}, \vec{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \exp\left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar} + \frac{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \cos\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) d\vec{p}, \quad (3a)$$

$$G_{21}(\vec{r}, \vec{r}', t) = -\frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \exp\left(-\frac{ip^2 t}{2m\hbar} + \frac{i\vec{p}(\vec{r} - \vec{r}')}{\hbar}\right) \sin\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) \frac{p_x + ip_y}{p} d\vec{p}, \quad (36)$$

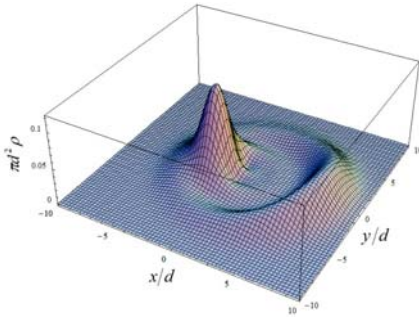


Рис. 1. Пространственное распределение электронной плотности.

Раздел **1.2** посвящен изучению динамики квазиодномерного гауссовского волнового пакета с различной спиновой ориентацией в двухмерной системе со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. В случае, когда в начальный момент времени спин направлен вдоль оси z , исходный гауссовский волновой пакет расщепляется при $t > 0$ на две части, распространяющиеся в противоположных направлениях. При этом обе части расщепившегося пакета расплываются с течением времени. Кроме того, анализ спиновой динамики показал, что расщепившиеся части исходного гауссовского волнового пакета имеют противоположные направления y -компоненты спина.

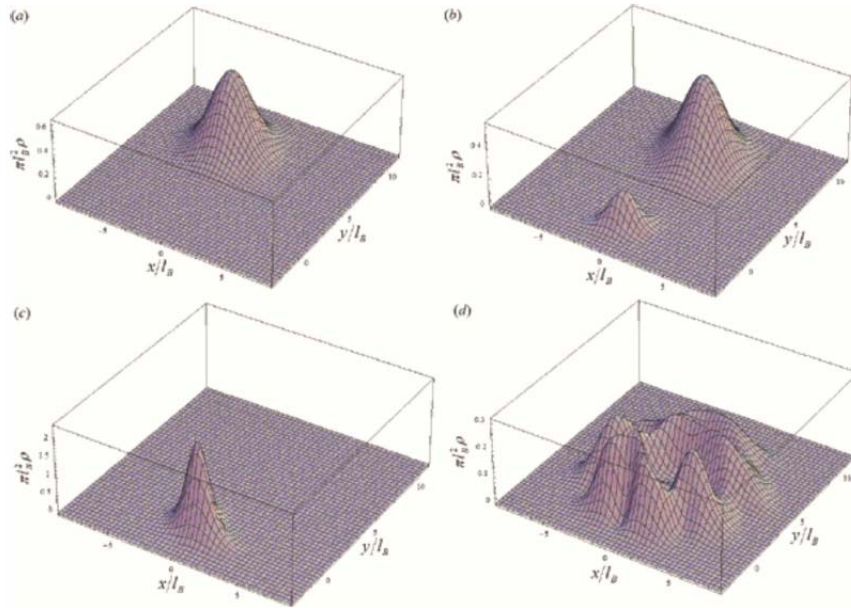


Рис. 2. Динамика электронного волнового пакета в магнитном поле.

Расчет средних компонент скорости центра волнового пакета показал, что осцилляции скорости происходят в направлении, перпендикулярном направлению распространения волнового пакета (так называемый “поперечный” *Zitterbewegung*). Причем эти осцилляции происходят с частотой $2k_0\alpha$ и с характерным временем затухания d/α , k_0 - начальный квазиимпульс волнового пакета, а d - исходная ширина волнового пакета. Найдено выражение для амплитуды осцилляций. В этом разделе исследовалось также изменение с

течением времени формы гауссовского волнового пакета в случае начальной ориентации спина вдоль оси y . Было установлено, что в этом случае расщепление волнового пакета отсутствует.

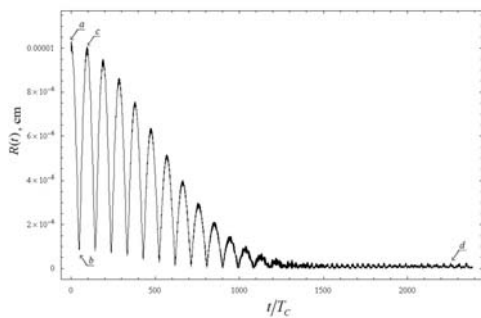


Рис. 3. Временная зависимость циклотронного радиуса $R(t)$.

В раздел 1.3 изучалась динамика двумерного гауссовского волнового пакета с различными спиновыми ориентациями и со средним импульсом, направленным вдоль оси x , в системе с СО взаимодействием Рашбы. Было показано, что СО взаимодействие меняет динамику электронной плотности. В общем случае, исходно симметричный волновой пакет теряет свою симметрию даже при нулевом начальном импульсе волнового пакета.

Причем в случаях начальной ориентации спина вдоль осей z (рис. 1) и x волновой пакет расщепляется на части, которые с течением времени разбегаются и расплываются. При этом центр волнового пакета испытывает осцилляции, и когда части пакета расходятся на расстояние, превышающее его первоначальную длину, эти осцилляции прекращаются. Направление осцилляций также связано с начальной ориентацией спина. Так, в случаях z - и x - поляризациях спина *Zitterbewegung* имеет поперечный характер (центр пакета осциллирует в направлении, перпендикулярном групповой скорости), а вот в случае y - ориентации начального спина мы наблюдаем явление продольного *Zitterbewegung* (центр волнового пакета осциллирует вдоль направления групповой скорости). Причем частота и характерное время затухания *Zitterbewegung* во всех трех рассмотренных примерах одинаковы и равны $2k_0\alpha$ и d/α соответственно. А вот амплитуда и направление осцилляций (как указывалось выше) зависят от начальной спиновой ориентации. Кроме того, различные части электронной плотности при $t > 0$ являются спин-поляризованными, т.е. части волнового пакета имеют различные знаки одной из компонент спиновой плотности. Также в работе было найдено аналитическое выражения для постоянной скорости центра пакета в случае произвольной спиновой поляризации. В частности, показано, что центр волнового пакета может перемещаться в пространстве даже при условии, что средний импульс равен нулю.

В разделе 1.4 изучалась нетипичная циклотронная динамика двумерного гауссовского волнового пакета со спиновой поляризацией вдоль оси z в перпендикулярном магнитном поле. Было показано, что вследствие спин-орбитального взаимодействия волновой пакет со спином, параллельным магнитному полю расщепляется на две части (см. рис.2),

которые вращаются по циклотронной орбите, и после этого возвращаются (многократно) в свое первоначальное состояние. С течением времени вследствие несоразмерности циклотронных частот и пакетного расщепления, электронная плотность распределяется по всей циклотронной орбите. Кроме того, проводилось исследование зависимости радиуса циклотронной орбиты от времени. Установлено, что осцилляции $R(t)$, представленные на рис. 3, связаны с эффектами периодического расщепления и соединения волновых

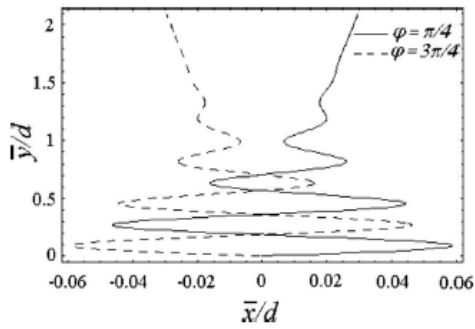


Рис.4. Траектории движения центра волнового пакета для двух начальных фаз: $\varphi = \pi/4$ и $\varphi = 3\pi/4$.

пакетов. Минимумы радиуса (точка b на рис. 3) приходятся на моменты времени, когда две расщепившиеся части волнового пакета локализованы на противоположных точках циклотронной орбиты. Радиус максимален (точки a и c на рис. 3) в момент времени, когда части расщепившегося пакета соединяются. По мере расщепления электронной плотности по всей циклотронной орбите амплитуда осцилляций уменьшается с течением времени (точка d на рис. 3).

Во **второй** главе рассматривается временная эволюция волновых пакетов с различной поляризацией псевдоспина в структуре монослойного графена. Гамильтониан такой системы вблизи точки \vec{K} имеет квазирелятивистский вид:

$$\hat{H} = u \vec{\sigma} \hat{p}, \quad (4)$$

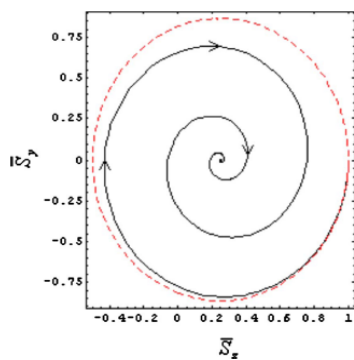


Рис. 5. Прецессия полного углового момента в (S_y, S_z) – плоскости.

где $u \approx 10^8$ см/с – фермиевская скорость, $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)$ – оператор импульса, определенный относительно точки \vec{K} зоны Бриллюэна, $\vec{\sigma}$ – матрицы Паули. Линейный закон дисперсии гамильтониана (4) выглядит следующим образом:

$$E_{p,s} = spu, \quad (5)$$

где $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$, $s = +1$ для электронов в зоне проводимости и $s = -1$ для валентной зоны («дырочная» энергетическая ветвь). Соответствующие собственные функции определяются квантовыми числами $\vec{p}(p_x, p_y)$ и индексом энергетической ветви $s = \pm 1$. Для анализа пространственно-временной эволюции волновых пакетов, как и

в предыдущей главе, используется метод функции Грина. Причем, сравнивая выражения (1) и (4), нетрудно видеть, что гамильтониан системы со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы переходит в гамильтониан монослойного графена при замене в первом:

$$x \rightarrow -y', \quad y \rightarrow x', \quad \alpha \rightarrow u, \quad m \rightarrow \infty. \quad (6)$$

Таким образом, используя переход (6), можно проанализировать динамику волновых пакетов в монослойном графене, используя результаты, полученные в предыдущей главе. Рассмотрим далее траекторию движения центра гауссовского волнового пакета со средним импульсом, направленным вдоль оси y , и следующими компонентами псевдоспина: $(1 \ e^{i\varphi})^T$, для двух случаев: $\varphi = \pi/4$ и $\varphi = 3/4$. Из рисунка 4 видно, что в случае произвольной поляризации псевдоспина *Zitterbewegung* происходит как в продольном, так и в поперечном направлении. Таким образом, изменяя начальную фазу φ , можно управлять движением пакета и, следовательно, направлением постоянного тока. Подобное поведение описывается полученными в диссертации аналитическими выражениями для координаты центра волнового пакета $\bar{\vec{r}}(t)$.

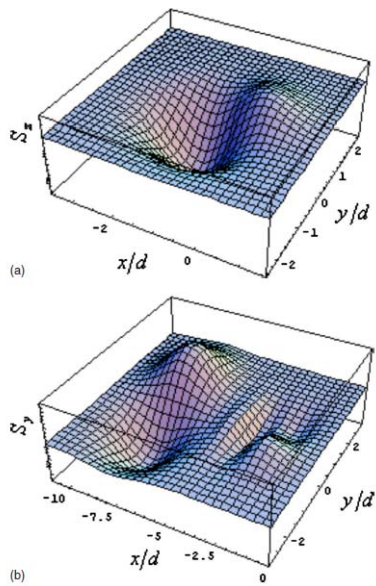


Рис.6. Распределения спиновых плотностей $S_z(\vec{r}, t)$ (a) и $S_y(\vec{r}, t)$ (b).

В третьей главе рассматривается динамика волновых пакетов легких и тяжелых дырок с эффективным спином, равным $3/2$ в трехмерных полупроводниках, описываемых изотропной моделью Латтинжера. При этом полагается, что размер начального волнового пакета в z направлении много больше, чем его ширина в x, y - плоскости. Таким образом, при такой постановке задачи волновую функцию в z направлении можно считать практически однородной, что позволяет рассматривать эволюцию волнового пакета в двумерной структуре с координатами x и y .

В разделе 3.1 получены аналитические выражения для компонент волновой функции в произвольный момент времени, а также для временной зависимости координат центра пакета. Обсуждаются два разных типа эволюции зависящих от некоего параметра $a = k_0 d$. В случае, когда параметр $a \gg 1$, исходно локализованный волновой пакет расщепляется на две части, распространяющиеся с различными групповыми скоростями и имеющими различную поляризацию эффективного спина. Аналогично динамики волнового пакета в системах со спин-

орбитальным взаимодействием, эта эволюция сопровождается осцилляциями центра пакета, или *Zitterbewegung*. Эти осцилляции быстро затухают, когда дистанция между двумя частями расщепившегося пакета превышает его начальную ширину. Другой сценарий эволюции реализуется для малого значения параметра a , т. е. когда $a \ll 1$. В этом случае плотность вероятности сохраняется практически аксиально-симметричной с течением времени, однако вокруг распределения плотности появляются небольшие волны («рябь»). Эта «рябь» увеличивается вследствие интерференции тяжелых и легких дырочных состояний, локализованных в окрестности точки $\vec{k}_0 = 0$ в импульсном пространстве. Заметим, однако, что эта интерференция не провоцирует осцилляции центра волнового пакета $\vec{r}(t)$, или *Zitterbewegung*. Последние результаты получены с помощью метода стационарной фазы.

В заключительном разделе третьей главы - **3.2** изучается спиновая динамика дырок, имеющих эффективный спин $3/2$. Главное свойство этой динамики в случае дырок – это нетривиальное периодическое движение вектора среднего спина в пространстве спинов, которое можно представить как прецессию даже в отсутствие внешнего магнитного поля (рис. 5). В данной главе детально исследовано это нестандартное поведение для дырочных волновых пакетов. Аналитически и численно изучено влияние параметра a на плотность углового момента и вектора среднего спина. Как было отмечено выше, в случае, когда $a \gg 1$ (рис. 6), плотность углового момента расщепляется на две части, имеющие мультипольную структуру поляризации; однако для $a \ll 1$ плотность углового момента практически сохраняет свою начальную цилиндрическую симметрию.

В Заключении сформулированы выводы, сделанные по результатам работы:

1. Показано, что СО взаимодействие качественно меняет динамику электронной плотности вследствие наличия состояний, принадлежащих различным ветвям энергетического спектра. Рассмотрено влияние начальной ориентации спина гауссовского волнового пакета со средним импульсом, направленным вдоль оси x , на его временную эволюцию в двумерной системе со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы.
2. Исследовано влияние начальной ориентации спина гауссовского волнового пакета на характеристики *Zitterbewegung*. Получено, что для рассмотренных в работе примеров частота и характерное время затухания ZB одинаковы, а амплитуда и направление осцилляций зависят от начальной спиновой поляризации.
3. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие качественно меняет циклотронную динамику заряженных частиц, вращающихся в перпендикулярном

магнитном поле. Рассмотрена временная зависимость радиуса циклотронной орбиты волнового пакета с затухающими осцилляциями.

4. Для систем со спин-орбитальным взаимодействием и в графене исследована пространственная симметрия полной электронной плотности в произвольный момент времени, исходя из вида гамильтониана рассматриваемой системы и формы начального волнового пакета.
5. Показано, что изменяя начальную разницу фаз между компонентами спинорной волновой функции, можно управлять движением пакета.
6. В изотропной модели Латтинжера рассмотрены два разных характера пространственно-временной эволюции волновых пакетов, зависящих от произведения начального квазиимпульса и начальной ширины волнового пакета.
7. В модели Латтинжера для дырочных волновых пакетов с эффективным угловым моментом $3/2$ исследовано нетривиальное периодическое движение вектора среднего спина в пространстве спинов, которое можно представить как прецессию даже в отсутствие магнитного поля.

В **Приложении А** рассматриваются квантовые состояния в потенциальном поле поверхностной сверхрешетки со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Обсуждается электронный энергетический спектр, спиновая плотность, ориентация среднего спина в x, y - плоскости.

В **Приложении В** рассматривается временная эволюция релятивистских 3D волновых пакетов, описываемых одночастичным уравнением Дирака. В этой системе проявляются основные особенности динамики волновых пакетов, характерные для систем с двухзонным электронным спектром.

Цитированная литература

- [1] Schrödinger, E. Über die kräftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik / E. Schrödinger // Sitzungsber. Peuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. - 1930. - Vol. 24. - Pp. 418-428.
- [2] Barut, A.O. *Zitterbewegung* and the internal geometry of the electron / A.O. Barut, A. J. Bracken // Phys. Rev. D. – 1981. - Vol. 23. - Pp. 2454-2463.
- [3] Gerritsma, R. Quantum simulation of the Dirac equation / R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, C.F. Roos // Nature. – 2010. - Vol. 463. - Pp. 68-71.
- [4] Datta, S. Electronic analog of the electro-optic modulator / S. Datta, B. Das // Appl. Phys. Lett. – 1990. - Vol. 56. - Pp. 665-667.

- [5] Pala, M.G. Two-dimensional hole precession in an all-semiconductor spin field effect transistor / M.G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke, G. Iannaccone // *Phys. Rev. B.* – 2004. - Vol. 69. - P. 045304.
- [6] Pereira, V.M. Strain engineering of graphene's electronic structure / V.M. Pereira, A.H. Castro Neto // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. - Vol. 103. – P. 046801.
- [7] Шикин, А.М. Квантовые состояния как посредники в магнитном взаимодействии / А.М. Шикин, О. Радер // *Природа.* – 2010. - № 5. - Стр. 18-26.
- [8] Демиховский, В.Я. Низкоразмерные структуры спинтроники. // Издательство Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, г. Н. Новгород. - 2007.
- [9] Schliemann, J. Spin Hall effect/ J. Schliemann // *Int. J. Mod. Phys. B.* – 2006. - Vol. 20. - Pp. 1015-1036.
- [10] Engel, H.-A. Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials / H.-A. Engel, E.I. Rashba, B.I. Halperin // Wiley, New York. – 2007.
- [11] Zutic, I. Spintronics: Fundamentals and applications / I. Zutic, J. Fabian, S. Das Sarma // *Rev. Mod. Phys.* – 2004. - Vol. 76. - Pp. 323-410.
- [12] Бычков, Ю.А. Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра / Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба // *Письма в ЖЭТФ.* – 1984. – Т. 39, № 2. – Стр. 66-69.
- [13] Lock, J.A. The *Zitterbewegung* of a free localized Dirac particle / J.A. Lock // *Am. J. Phys.* - 1979. - Vol. 47. - Pp. 797-802.
- [14] Thaller, B. Visualizing the kinematics of relativistic wave packets / B. Thaller // *arXiv:quantph/0409079v1*, 14 Sep 2004.
- [15] Dresselhaus, G. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures / G. Dresselhaus // *Phys. Rev.* – 1955. - Vol. 100. - Pp. 580-586.
- [16] Schliemann, J. *Zitterbewegung* of Electronic Wave Packets in III-V Zinc-Blende Semiconductor QuantumWells / J. Schliemann, D. Loss, R.M. Westervelt // *Phys. Rev. Lett.* - 2005. - Vol. 94. - P. 206801.
- [17] Schliemann, J. *Zitterbewegung* of electrons and holes in III–V semiconductor quantum wells / J. Schliemann, D. Loss, R.M. Westervelt // *Phys. Rev. B.* - 2006. - Vol. 73. - P. 085323.
- [18] Demikhovskii, V.Ya. Wave packet dynamics in a two-dimensional electron gas with spin orbit coupling: Splitting and *Zitterbewegung* / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, E.V. Frolova // *Phys. Rev. B.* – 2008. - Vol. 78. - P. 115401.
- [19] Jiang, Z.F. Semiclassical time evolution of the holes from Luttinger Hamiltonian / Z.F. Jiang, R.D. Li, S.-C. Zhang, W.M. Liu // *Phys. Rev. B.* – 2005. - Vol. 72. - P. 045201.
- [20] Demikhovskii, V.Ya. Wave packet dynamics in hole Luttinger systems / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, E.V. Frolova // *Phys. Rev. B.* - 2010. - Vol. 81. – P. 115206.

- [21] Khodas, M. Spin Polarization of Electrons by Nonmagnetic Heterostructures: The Basics of Spin Optics / M. Khodas, A. Shekhter, A. Finkel'stein // Phys. Rev. Lett. – 2004. - Vol. 92. - P. 086602.
- [22] Shekhter, A. Diffuse emission in the presence of an inhomogeneous spin-orbit interaction for the purpose of spin filtration / A. Shekhter, M. Khodas, A.M. Finkel'stein // Phys. Rev. B. – 2005. - Vol. 71. - P. 125114.
- [23] Chen, H. Spin-polarized reflection in a two-dimensional electron system / H. Chen, J.J. Heremans, J.A. Peters, A.O. Govorov, N. Goel, S.J. Chung, M.B. Santos // Appl. Phys. Lett. – 2005. - Vol. 86. - Pp. 032113-032115.
- [24] Usaj, G. Transverse electron focusing in systems with spin-orbit coupling / G. Usaj, C.A. Balseiro // Phys. Rev. B. – 2004. - Vol. 70. - P. 041301(R).
- [25] Rokhinson, L.P. Spin Separation in Cyclotron Motion / L.P. Rokhinson, V. Larkina, Y.B. Lyanda-Geller, L.N. Pfeiffer, K.W. West // Phys. Rev. Lett. - 2004. - Vol. 93. - P. 146601.
- [26] Winkler, R. Oscillatory multiband dynamics of free particles: The ubiquity of *Zitterbewegung* effects / R. Winkler, U. Zülicke, J. Bolte // Phys. Rev. B. – 2007. - Vol. 75. - P. 205314.
- [27] Zülicke, U. Magnetic focusing of charge carriers from spin-split bands: semiclassics of a *Zitterbewegung* effect/ U. Zülicke, J. Bolte, R. Winkler// New J. Phys.– 2007.- Vol. 9. - P. 355.
- [28] Schliemann, J. Cyclotron motion and magnetic focusing in semiconductor quantum wells with spin-orbit coupling / J. Schliemann // Phys. Rev. B. – 2008. - Vol. 77. - P. 125303.
- [29] Wallace, P.R. The band theory of graphite // Phys. Rev. – 1947. - Vol. 71. - Pp. 622-634.
- [30] Slonczewski, J.C. Band structure of graphite / J.C. Slonczewski, P.R. Weiss // Phys. Rev. - 1958. - Vol. 109. - Pp. 272-279.
- [31] Novoselov, K.S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov // Nature. - 2005. - Vol. 438. - Pp. 197-200.
- [32] Novoselov, K.S. Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of 2π in bilayer graphene / K.S. Novoselov, E. McCann, S.V. Morozov, V.I. Fal'ko, M.I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, A.K. Geim // Nature Physics. – 2006. - Vol. 2. - Pp. 177-180.
- [33] Zhang, Y. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene/ Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim// Nature.–2005.- Vol. 438. - Pp. 201-204.
- [34] Rusin, T.M. Transient *Zitterbewegung* of charge carriers in mono and bilayer graphene, and carbon nanotubes / T.M. Rusin, W. Zawadzki // Phys. Rev. B. – 2007. - Vol. 76. - P. 195439.
- [35] Rusin, T.M. *Zitterbewegung* of electrons in graphene in a magnetic field / T.M. Rusin, W. Zawadzki // Phys. Rev. B. – 2008. - Vol. 78. - P. 125419.
- [36] Maksimova, G.M. Wave packet dynamics in a monolayer grapheme / G.M. Maksimova, V.Ya. Demikhovskii, E.V. Frolova // Phys. Rev. B. – 2008. - Vol. 78. - P. 235321.

[37] Culcer, D. Coherent wave-packet evolution in coupled bands / D. Culcer, Y. Yao, Q. Niu // Phys. Rev. B. – 2005. - Vol. 72. - P. 085110.

Список работ автора по теме диссертации

1А. Demikhovskii, V.Ya. Wave packet dynamics in hole Luttinger systems / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, E.V. Frolova // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81. – P. 115206; cond-mat/arXiv:0912.0331v1.

2А. Demikhovskii, V.Ya. Wave packet dynamics in a two-dimensional electron gas with spin orbit coupling: Splitting and *Zitterbewegung* / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, E.V. Frolova // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – P. 115401; cond-mat/arXiv: 0805.4489v2.

3А. Maksimova, G.M. Wave packet dynamics in a monolayer graphene / G.M. Maksimova, V.Ya. Demikhovskii, E.V. Frolova // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 78. – P. 235321; cond-mat/arXiv:0809.0367v1.

4А. Демиховский, В.Я. Динамика 2D электронных волновых пакетов с различной начальной поляризацией спина в двумерных структурах со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова // Известия РАН. Серия физическая. – 2009. – Т. 73, №5. - Стр. 737-740 (Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2009. - Vol. 73, No.5. - Pp. 697-699).

5А. Демиховский, В.Я. Расщепление волновых пакетов и *Zitterbewegung* в двумерных полупроводниковых структурах со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова // Поверхность. РСНИ. – 2009. – Т. 9. – Стр. 24-32.

6А. Демиховский, В.Я. Поверхностные сверхрешетки в системах со спин-орбитальным взаимодействием: квантовые состояния и блоховские осцилляции в электрическом поле / В.Я. Демиховский, А.А. Каякин, Е.В. Фролова // Поверхность. РСНИ. – 2008. – Т. 8. - Стр. 15-22 (Journal of Surface Investigation.– 2008. - Vol. 2, No. 4. - Pp. 596-603).

7А. Фролова, Е.В. Эволюция волновых пакетов в двумерных структурах со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза / Е.В. Фролова, Н.А. Кравец // Вестник ННГУ. - 2010 (принято в печать).

8А. Demikhovskii, V.Ya. Space-time evolution of Dirac wave packets / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, A.A. Perov, E.V. Frolova // arXiv:1007.1566v1, 9 Jul 2010.

9А. Демиховский, В.Я. Эволюция электронных волновых пакетов в структурах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и в графене / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова // Труды международного симпозиума “Нанопизика и наноэлектроника”. - г. Н. Новгород, 2009. - Стр. 173-174.

10А. Демиховский, В.Я. Осцилляторная динамика электронных волновых пакетов в кристаллических твердых телах / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова //

Труды второго международного симпозиума “Среды со структурным и магнитным упорядочением”. - г. Ростов-на-Дону, 2009. - Стр. 64-67.

11А. Демиховский, В.Я. Эволюция волновых пакетов в двумерных структурах со спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза / В.Я. Демиховский, Е.В. Фролова, Н.А. Кравец // Материалы XV Нижегородской сессии молодых ученых. – г. Н. Новгород, 2010 (принято в печать).

12А. Фролова, Е.В. Динамика электронных волновых пакетов с различными начальными спиновыми поляризациями в структурах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы // Материалы XIV Нижегородской сессии молодых ученых. – г. Н. Новгород, 2009. - Стр. 19.

13А. Демиховский, В.Я. Динамика электронных волновых пакетов в двумерных структурах со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова // Труды первого международного междисциплинарного симпозиума “Физика низкоразмерных систем”. - г. Ростов-на-Дону, 2008. - Стр. 98-101.

14А. Демиховский, В.Я. Эволюция волновых пакетов в структуре однослойного графена / В.Я. Демиховский, Г.М. Максимова, Е.В. Фролова // Тезисы 3-ей Всероссийской школы молодых ученых “Микро-, нанотехнологии и их применение”. - г. Черноголовка, 2008. - Стр. 41-42.

15А. Демиховский, В.Я. Динамика волнового пакета в квантовой структуре со спин-орбитальным взаимодействием, находящейся в перпендикулярном магнитном поле / В.Я. Демиховский, Е.В. Фролова // Труды международного симпозиума “Нанопизика и наноэлектроника”. - г. Н. Новгород, 2008. - Стр. 355-356.

16А. Фролова, Е.В. Расщепление и *Zitterbewegung* волновых пакетов в системах со спин-орбитальным взаимодействием // Материалы XIII Нижегородской сессии молодых ученых. - г. Н. Новгород, 2008. - Стр. 83.

17А. Демиховский, В.Я. Поверхностные сверхрешетки в системах со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Е.В. Фролова // Труды первого международного, междисциплинарного симпозиума “Среды со структурным и магнитным упорядочением”. - г. Ростов-на-Дону, 2007. - Стр. 235-237.

18А. Демиховский, В.Я., Поверхностные сверхрешетки в системах со спин-орбитальным взаимодействием: квантовые состояния и блоховские осцилляции в электрическом поле / В.Я. Демиховский, А.А. Каякин, Е.В. Фролова // Труды международного симпозиума “Нанопизика и наноэлектроника”. - г. Н. Новгород, 2007. - Стр. 319-320.

19А. Демиховский, В.Я. Двумерные поверхностные сверхрешетки в системах со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Е.В. Фролова // Материалы XII Нижегородской сессии молодых ученых. - г. Н. Новгород, 2007. - Стр.73.

20А. Фролова, Е.В. Поверхностные сверхрешетки со спин-орбитальным взаимодействием // Студенческая научная конференция. - г. Н. Новгород, 2007. - Стр.31-32.