

Dokładność równania masy efektywnej w nanostrukturach

Adam Mielnik-Pyszczorski, Krzysztof Gawarecki, and Paweł Machnikowski

*Katedra Fizyki Teoretycznej, Wydział Podstawowych Problemów Techniki,
Politechnika Wroclawska, Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

W niniejszej prezentacji powracamy do wyprowadzenia efektywnego hamiltonianu stanów pasma przewodnictwa w kropce kwantowej wychodząc z 8-pasmowego modelu $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. W celu uzyskania 2-pasmowego hamiltonianu masy efektywnej, który jakościowo poprawnie odtworzy wyniki metody 8-pasmowej, przeprowadzamy rygorystyczne odprężanie podpasm pasma walencyjnego. Aby sprawdzić możliwą do uzyskania dokładność przybliżenia masy efektywnej, wykonujemy symulacje stanów elektronowych w pojedynczej oraz podwójnej samorosnącej kropce kwantowej.

W pierwszym kroku odtwarzamy widmo energetyczne układu. Ponieważ w wielu przypadkach interesujące są stan podstawowy (typu s) oraz wzbudzony (typu p), to porównujemy ich różnicę energii ΔE_{s-p} , uzyskaną w różnych wersjach przybliżenia masy efektywnej, z wynikami metody 8-pasmowej. Analizujemy także wartość czynnika Landégo, odpowiedzialnego za zachowanie spinu w zewnętrznym polu magnetycznym. Kolejnym problemem, do którego się odnosimy jest efekt mieszania stanów spinowych wynikający z niejednorodności struktury. Badamy zmieszanie dwóch przeciwnych orientacji wyznaczając szerokość anticrossingu dla tunelowania z obrotem spinu w układzie podwójnej kropki kwantowej.

Modelowanie rzeczywistych nanostruktur oparte o obliczenia numeryczne jest ważnym narzędziem fizyki półprzewodników. Badana tutaj metoda $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ przysłużyła się do udanego modelowania dynamiki nośników, wpływu odkształceń, odpowiedzi na zewnętrzne pole magnetyczne, itd. [1]. Jednakże modele wielopasmowe wymagają znacznej mocy obliczeniowej do symulowania dużych układów. Szczególnie problematyczne są obliczenia dla sprzężonych nanostruktur o różnej wymiarowości (typu studnia-kropka [2]), ponieważ konieczne jest połączenie dużego pudła obliczeniowego z gęstą siecią dyskretyzacji. Pewnym uproszczeniem, podczas rozważań dotyczących stanów elektronowych, jest przybliżenie hamiltonianu układu modelem jedno- lub dwupasmowym. Pomimo oczywistych przybliżeń i ograniczeń, wydajność numeryczna zwiększa ich wartość. Ponadto, modele te umożliwiają wprowadzenie wielkości efektywnych (takich jak masa efektywna), które stwarzają analogie do dobrze znanych efektów kwantowo-mechanicznych oraz pozwalają analizowane zagadnienia fizyczne bardziej transparentnymi.

Nasze wyniki pokazują, że odpowiednio skonstruowane, spójne wewnętrznie równanie masy efektywnej z poprawkami nieparabolicznymi umożliwia ilościowy opis spektrum energetycznego, włączając w to rozszczepienie Zeemana. Z drugiej jednak strony, demonstrujemy ograniczenia przybliżenia masy efektywnej w modelowaniu bardziej wyrafinowanych efektów, jak domieszka spinu przeciwnego wywołana niejednorodnością układu i łamaniem symetrii. Wierzimy, że nasze wyniki rzucają pewne nowe światło na wieloletnie zagadnienie, szczególnie w kontekście bieżących problemów w numerycznym modelowaniu nanostruktur.

[1] P.-L. Ardel, K. Gawarecki, K. Müller, A. A. Waeber, A. Bechtold, K. Oberhofer, J. J. Daniels, F. Klotz, M. Bichler, T. Kuhn, H. H. Krenner, P. Machnikowski, and J. J. Finley, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 077401 (2016).

[2] A. Mielnik-Pyszczorski, K. Gawarecki, P. Machnikowski, *Phys. Rev. B* **91**, 195421 (2015).