

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

На правах рукописи



Конаков Антон Алексеевич

**СПИНОВОЕ СМЕШИВАНИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ
В СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЯ, НИТРИДА ГАЛЛИЯ И
ДВУМЕРНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, доцент
Бурдов Владимир Анатольевич

Нижний Новгород
2016

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Приближение огибающей функции для исследования квантовых состояний в объемных полупроводниках и полупроводниковых структурах	15
1.1. Приближение огибающей функции: постановка задачи	17
1.2. Полнозонное приближение огибающей функции.....	18
1.3. Переход к одно- и многозонным эквивалентным гамильтонианам	24
1.4. Приближение огибающей функции в многодолинном полупроводнике	27
1.5. Приближение огибающей функции при учете релятивистских поправок	29
1.6. Заключительные замечания по Главе 1	34
1.7. Выводы по Главе 1	36
Глава 2. Спиновое смешивание в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов.....	37
2.1. Спиновые свойства кремниевых нанокристаллов: вводные замечания	37
2.2. Эквивалентный гамильтониан в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов при учете спин-орбитального взаимодействия	38
2.3. Параметр спинового смешивания в кремниевых нанокристаллах.....	45
2.4. Заключительные замечания по Главе 2.....	49
2.5. Выводы по Главе 2	52
Глава 3. Теория модификация g -фактора электронов проводимости в кремнии в результате взаимодействия с фононами и примесными центрами	53
3.1. Обзор литературы по проблеме температурной зависимости g -фактора электронов проводимости в кремнии	54
3.2. Квантовые состояния вблизи дна зоны проводимости объемного кремния в присутствии слабого внешнего однородного магнитного поля.....	56
3.3. Наблюдаемый g -фактор электронов проводимости: связь с одноэлектронными параметрами.....	57
3.4. Теория перенормировки g -фактора электронов проводимости при взаимодействии с полем фононов.....	59
3.5. Температурная зависимость g -фактора электронов проводимости в кремнии: расчет и сравнение с экспериментом	63
3.6. Зависимость g -фактора электронов проводимости в кремнии от концентрации легирующей донорной примеси	67
3.7. Заключительные замечания по Главе 3	69
3.8. Выводы по Главе 3	70

Глава 4. Электронные состояния и оптическая щель в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы	71
4.1. Сферические нанокристаллы нитрида галлия в широкозонных диэлектрических матрицах: вводные замечания.....	71
4.2. Электронные и дырочные состояния в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы	72
4.3. Оптическая щель нанокристаллов нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы	81
4.4. Излучательная рекомбинация в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы	84
4.5. Заключительные замечания по Главе 4.....	87
4.6. Выводы по Главе 4	88
Глава 5. Электронные состояния в магнитно-индуцированных квантовых точках на краю двумерного топологического изолятора.....	90
5.1. $k\cdot p$ -гамильтониан на краю двумерного топологического изолятора HgTe/CdHgTe ...	90
5.2. Модель магнитно-индуцированной квантовой точки на краю двумерного топологического изолятора	92
5.3. Квантовые состояния в магнитно-индуцированной квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора.....	94
5.4. Спиновая плотность и поляризация состояний в симметричной магнитно-индуцированной квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора.....	96
5.5. Заключительные замечания по Главе 5	98
5.6. Выводы по Главе 5	98
Заключение.....	99
Благодарности.....	100
Список работ автора по теме диссертационного исследования	101
Перечень сокращений и условных обозначений.....	103
Список литературы.....	106

Введение

Актуальность темы исследования

Совершенствование информационных и коммуникационных технологий сегодня невозможно представить без своевременной модернизации электронной компонентной базы. Развитие же электроники базируется главным образом на полупроводниковой технологии, где ключевым элементом по-прежнему является кремний (Si). Si привлекателен ввиду своего широкого распространения в Природе (его массовая доля в земной коре составляет 27.7 % [1]), относительной нетоксичности, устойчивости к химическим воздействиям, наличия отработанных технологий получения как моно-, так и поликристаллических массивных образцов, возможности получения высокочистого Si заданного качества. Все эти факторы, безусловно, способствовали ранее и благоприятствуют в настоящее время развитию кремниевой технологии в микроэлектронике.

Тем не менее, не смотря на несомненные общие преимущества Si в сравнении с другими материалами, в ряде случаев его применение ограничено фундаментальными физико-химическими особенностями. Во-первых, внедрение Si в оптические приложения затруднено ввиду непрямозонности его энергетической зонной структуры. Во-вторых, традиционные компоненты электронной техники на основе Si фактически достигли предела своего быстродействия, и дальнейшее увеличение производительности приборов связано не с повышением скорости работы отдельных компонент, а лишь с наращиванием количества функциональных элементов. Наконец, бурно развивающиеся в последние годы квантовые вычислительные технологии вообще не предполагают массового внедрения, ориентируясь на единичное производство (например, квантовых компьютеров). В этом случае одно из основных преимуществ Si – его широкое распространение – теряет свою роль, и для разработки приборов можно использовать и другие, гораздо более редкие материалы, физические и физико-химические свойства которых в конкретных приложениях могут заметно превосходить кремниевые.

Среди существующих в настоящее время путей развития полупроводниковой технологии, направленных на решение указанных проблем, можно выделить четыре направления, обсуждаемых в диссертации. Первый подход заключается в получении на основе Si и прочих материалов, традиционно используемых в планарной технологии, структур, в частности, наноразмерных, физические свойства которых, необходимые для реализации конкретных приложений, превосходили бы свойства объемного материала. Оптические характеристики кремниевых нанокристаллов (НК) – квантовых точек (КТ) с размерами всего несколько нанометров – заметно превосходят аналогичные параметры массивных образцов, что

делает их одним из наиболее перспективных объектов для внедрения в оптоэлектронику и фотонику [2]. Кроме того, ограничение движения носителей заряда в наноразмерных областях пространства, характерное для нанокристаллического Si, открывает возможности его использования также для создания элементов памяти [3].

Второе направление развития заключается в адаптации существующих и уже отработанных технологических решений для использования ранее не задействованных свойств носителей заряда в Si и традиционных структурах на его основе. В этой связи большую привлекательность имеет развитие методов управления спиновой степенью свободы электронов проводимости с целью построения приборов спинтроники, обладающих значительно более высокими скоростными, емкостными и энергосберегающими характеристиками в сравнении с современными аналогами. Si как материал спинтроники привлекателен из-за слабого спин-орбитального взаимодействия (COB), больших времен спиновой релаксации и длин спиновой диффузии [4], что заметным образом расширяет возможности воздействия на спиновую подсистему и, соответственно, проектирования спиновых приборов различной архитектуры. Долгое время развитию этого направления препятствовала непрямозонность электронной структуры Si, затрудняющая эффективную оптическую ориентацию для формирования спиновой поляризации в зоне проводимости. Однако пионерские эксперименты по электрической спиновой инжекции из ферромагнетика в Si [5], в том числе и при комнатной температуре (T) [6], стали отправной точкой для новых исследований в области кремниевой спинтроники.

Управляемое воздействие на спиновую степень свободы электронов проводимости может производиться как с помощью внешнего электрического поля, что может быть положено в основу, например, спиновых полевых транзисторов, так и посредством магнитного поля. Последнее, в частности, составляет основу так называемой магнитной спинтроники. При этом ключевую роль играет прецизионное знание фактора Ландэ (g -фактора) возбужденных носителей, определяющего величину зеемановского расщепления вырожденного по спину уровня энергии во внешнем магнитном поле и парамагнитную восприимчивость ансамбля электронных спинов в целом.

Кроме того, как показывают многочисленные исследования спиновых явлений в полупроводниковых структурах [7], с понижением размерности может заметно снижаться скорость спиновой релаксации, возрастать длина спиновой диффузии, и, соответственно, существенно расширяются технологические возможности по проектированию различных приборов спинтроники. В связи с этим большой интерес представляет изучение спиновых явлений в кремниевых структурах пониженной размерности, в частности, в кремниевых НК.

Третье направление развития планарной технологии микроэлектроники заключается в совмещении с Si других материалов, в том числе и нетрадиционных, свойства которых способствовали бы разработке приборов с характеристиками, превосходящими стандартные аналоги. Такой подход, во-первых, позволяет избежать принципиального перехода к новой технологической платформе и сохранить тем самым потенциал для массового производства, во-вторых, дает возможность преодолеть фундаментальные ограничения, обусловленные физическими свойствами Si, посредством его «точечной» замены на другие материалы. В частности, активно ведутся исследования в области совмещения с кремниевой технологией графена [8], полупроводниковых соединений III-V [9] и даже узкозонных полупроводников со структурой теллурида висмута [10, 11].

Особое внимание сейчас уделяется сочетанию с кремниевой технологией нитрида галлия (GaN). Он представляет собой широкозонный нетоксичный биосовместимый полупроводник, который применяется главным образом для создания синих светоизлучающих диодов и источников белого света. GaN привлекателен также за счет высокой радиационной стойкости, устойчивости к термическим и химическим воздействиям. Актуальность исследования систем с GaN подтверждена также недавней Нобелевской премией по физике 2014 г. Однако его совмещение с кремниевой технологией затруднено ввиду ряда причин. Во-первых, GaN кристаллизуется в двух структурных типах – сфалерита (кубическая фаза, c-GaN) и вюрцита (гексагональная фаза, w-GaN), в каждой из которых имеет с Si существенное рассогласование в параметрах решеток (а в случае гексагональной фазы различны даже и структурные типы двух кристаллов). Во-вторых, на 14 % отличаются коэффициенты их термического расширения [12], что сказывается, в частности, на качестве эпитаксиально выращенных структур.

Одним из технологических решений проблемы является формирование НК GaN в Si-совместимых аморфных диэлектрических матрицах [13, 14]. В этом случае механические напряжения, препятствующие образованию бездефектных структур, демпфируются частично или полностью, а электронными, оптическими и электрическими свойствами GaN становится возможным управлять посредством изменения размеров кристаллитов, в частности, за счет эффекта размерного квантования [14].

Наконец, четвертый путь заключается и вовсе в развитии некремниевой технологии, где выбор используемых материалов диктуется в первую очередь их уникальными, возможно, даже отличными от привычных полупроводников физическими свойствами, а не совместимостью с традиционными методиками. К подобным веществам относятся топологические изоляторы (ТИ) – особый класс диэлектриков, на границе которых с вакуумом или традиционным полупроводником возникают поверхностные состояния, энергетический спектр которых перекрывает запрещенную зону объемного материала, и имеет форму конуса Дирака [15, 16].

Такие состояния обладают определенной спиновой поляризацией, и на краю двумерных (2D) ТИ электроны, заселяющие их, не испытывают акты упругого рассеяния на немагнитных примесях. Эти свойства открывают перспективы использования ТИ в области разработки кубитов – единичных разрядов квантовой информации (элементов квантовых компьютеров), где одно из ключевых требований состоит в больших временах декогеренции, т.е. в устойчивости системы к внешним воздействиям. В связи с этим особый интерес вызывает получение и применение именно компактных наноразмерных объектов на основе ТИ, которые уже сейчас возможно изготавливать на основе современной технологической платформы [17].

Идущее в нескольких направлениях технологическое развитие ставит серьезный вызов перед физиками-теоретиками – задачу расчета и изучения электронных и спиновых свойств полупроводниковых структур, включая предсказание объектов с перспективными характеристиками для дальнейшей экспериментальной реализации. Именно таким исследованиям и посвящена диссертационная работа.

Степень разработанности темы исследования

1. Электронные состояния в кремниевых НК являются объектом интенсивных исследований, начиная с 1990х гг. В частности, расчет энергетической структуры кристаллитов кремния выполнялся ранее в работах многих авторов (G. Allan, F. Bechstedt, C. Bulutay, C. Delerue, M. Lannoo, S. Ossicini, A. Zunger, В.А. Бурдов, А.С. Москаленко, А.Н. Поддубный, А.А. Прокофьев, И.Н. Ясиевич и др.). Однако ввиду малости СОВ в Si, оно либо вообще не учитывалось в расчетах, либо принималось во внимание только для орбитально вырожденной валентной зоны. Тем не менее, хорошо известно, что скорости спиновой релаксации для электронов проводимости в полупроводниках заметно меньше, чем для дырок [7]. Таким образом, для оценки принципиальной возможности использования кремниевых НК в приборах спинтроники требуется расчет квантовых состояний в зоне проводимости при учете СОВ.

2. Впервые теоретический анализ фактора Ландэ электронов проводимости в Si был проведен в работе [18] с применением *k-p*-метода и теории возмущений по СОВ, а расчет, давший хорошее согласие с классическими экспериментальными данными [19], выполнен в [20] с применением метода ортогонализированных плоских волн расчета зонной структуры. Однако последующие исследования электронного спинового резонанса (ЭСР) в легированном Si *n*-типа проводимости показали, что экспериментально наблюдаемый *g*-фактор существенно зависит от *T* [21] и концентрации легирующей примеси [22], что, конечно, не описывается в рамках зонной теории. Теоретического анализа зависимости фактора Ландэ электронов проводимости в Si от *T* и концентрации легирующей донорной примеси ранее не выполнялось.

3. НК, полученные в полупроводниковых и диэлектрических матрицах методом ионно-

лучевого синтеза, как правило, имеют форму, близкую к сферической, в силу физических механизмов, лежащих в основе процесса их зарождения [3]. Электронные и дырочные спектры сферических кристаллитов GaN со структурой как сфалерита, так и вюрцита изучались ранее в работе [23]. Тем не менее, выполненный там расчет обладал существенным недостатком с точки зрения различных оптических приложений: задача решалась в приближении бесконечно глубокой потенциальной ямы для носителей заряда в обеих зонах, что приводит к существенному завышению энергии квантовых состояний [24] и, соответственно, недооценке длины волны основного межзонного излучательного перехода. Реалистичный расчет энергетических спектров внедренных в различные диэлектрические матрицы НК GaN, учитывающий конечные разрывы зон на гетерогранице, к настоящему времени не выполнялся.

4. Возможное применение ТИ в задачах квантовых вычислений впервые было рассмотрено в работе [25], где предложена модель кубита, полученного посредством нанесения магнитного нанодиска на поверхность трехмерного (3D) ТИ. Существование пары невырожденных уровней в такой системе обусловлено формированием краевых токов на границе раздела «ферромагнетик / диэлектрик». Тем не менее, на поверхности 3D ТИ возможны процессы декогеренции за счет рассеяния электронов с изменением направления волнового вектора в плоскости 2D газа, что может существенно ограничить применимость таких кубитов на практике.

Более перспективными для использования в задачах квантового компьютеринга являются 2D ТИ HgTe/CdHgTe, для построения кубитов на основе которых можно нанести магнитные полоски на их край. Теоретические исследования электронных состояний в КТ, образованных парой намагниченных контактов на краю 2D ТИ, проводились ранее в работах [26, 27]. Однако как в [26], так и позднее в [27] барьеры для носителей считались непроницаемыми, что приводит к бесконечно большому числу уровней в системе. В результате, такой подход к описанию не позволяет оценить возможность использования этих КТ для задач квантовых вычислений. Исследования КТ, образованной между магнитными барьерами на краю 2D ТИ, с учетом проникновения волновой функции под барьер ранее не проводились.

Цели диссертационного исследования

Целью работы является теоретическое исследование влияния размерного квантования на электронную и спиновую структуру, а также межзонные оптические переходы в нульмерных объектах на основе кремния, нитрида галлия и двумерных топологических изоляторов. Кроме того, работа предполагает исследование температурной зависимости линейного отклика спиновой подсистемы электронов проводимости в кремнии на внешнее магнитное поле, для

чего будет построена теория перенормировки фактора Ландэ, обусловленной рассеянием на фонах, и проанализировано влияние легирования мелкими донорами на величину g -фактора.

Задачи диссертационного исследования

1. Расчет квантовых состояний в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов при учете спин-орбитального взаимодействия.

2. Вычисление поправок к g -фактору электронов проводимости в кремнии, обусловленных электрон-фононным взаимодействием и рассеянием на ионизованных донорах.

3. Расчет электронных и дырочных спектров, оптической щели и времен межзонных излучательных переходов в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в различные диэлектрические матрицы.

4. Определение спектров и волновых функций электронов в квантовых точках, образованных между двумя ферромагнитными полосками-«барьерами», нанесенными на край двумерного топологического изолятора $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$, с учетом проникновения волновой функции в подбарьерную область.

Научная новизна работы

1. Впервые исследованы квантовые состояния в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов сферической формы при учете спин-орбитального взаимодействия. Рассчитана зависимость параметра межзонного спинового смешивания от размера кристаллита, являющаяся возрастающей функцией размера.

2. Построена оригинальная теория температурной зависимости g -фактора электронов проводимости в кремнии, базирующаяся на перенормировке энергии электрона во внешнем магнитном поле посредством взаимодействия с полем фононов. Показано, что уменьшение электронного фактора Ландэ с ростом температуры главным образом определяется вызванной перераспределением носителей во внешнем магнитном поле неэквивалентностью виртуальных междолинных переходов второго порядка. Также впервые рассчитаны поправки к фактору Ландэ электронов проводимости в кремнии, обусловленные процессами переворота спина Эллиотта-Яфета. Предложенная теория обобщена на случай рассеяния на ионизованных донорах. Показано, что в борновском приближении электронный g -фактор уменьшается линейно с ростом концентрации примеси. Результаты теоретических расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

3. Впервые рассчитана оптическая щель нанокристаллов нитрида галлия сферической формы в различных широкозонных диэлектрических матрицах. Показано, что длина волны

основного межзонного перехода лежит в ультрафиолетовой области спектра с нижней границей, приблизительно равной 240 нм.

4. Впервые рассчитаны и исследованы энергетические спектры и волновые функции электронов, локализованных с помощью двух туннельно-прозрачных магнитных барьеров на краю двумерного топологического изолятора HgTe/CdHgTe. Показано, что при одинаковой намагниченности барьеров в сколь угодно узкой квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора будет существовать пара невырожденных уровней, расположенных симметрично относительно точки Дирака. Спиновые поляризации отвечающих этим уровням квантовых состояний равны по модулю, но имеют противоположные направления.

Теоретическая значимость работы

Разработанные автором диссертационного исследования подходы к изучению межзонного спинового смешивания для электронов в сферических кремниевых нанокристаллах и к определению зависимости g -фактора электронов проводимости в кремнии от температуры и концентрации легирующей примеси могут быть обобщены на случай произвольного полупроводника с орбитально невырожденной зоной проводимости.

Практическая значимость работы

Практическая значимость результатов диссертационного исследования заключается в возможности их использования при проектировании спиновых приборов на базе объемного и нанокристаллического кремния, фотоприемников на основе внедренных в диэлектрические матрицы кристаллитов нитрида галлия, а также при разработке кубитов на основе двумерных топологических изоляторов.

Методология и методы исследования

При решении поставленных задач применялись хорошо апробированные и известные по литературе методы электронной теории твердого тела: приближение огибающей для описания квантовых состояний в наноразмерных объектах, метод функций Грина для расчета поправок к g -фактору электронов проводимости и теория возмущений Рэлея-Шредингера.

Положения, выносимые на защиту

1. В кремниевых нанокристаллах спин-орбитальное взаимодействие приводит к смешиванию состояний с противоположными проекциями спина в зоне проводимости. Коэффициент смешивания определяется межзонной спин-орбитальной связью зоны

проводимости и валентной зоны и является возрастающей функцией радиуса нанокристалла в диапазоне от 1 до 5 нм.

2. Зависимость g -фактора электронов проводимости в кремнии от температуры в диапазоне 80–250 К определяется сохраняющимися спин виртуальными междолинными переходами, идущими с участием фононов, во втором порядке теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию.

3. Рассчитанная в рамках приближения огибающей функции длина волны излучения основного межзонного перехода в нанокристаллах нитрида галлия как кубической, так и гексагональной фаз, внедренных в аморфные диэлектрические матрицы диоксида кремния, оксида алюминия, нитрида кремния и диоксида гафния, лежит в ближнем ультрафиолетовом диапазоне спектра, составляя 250 ± 20 нм (в зависимости от матрицы и структурного типа нитрида галлия) для нанокристаллов с диаметром 2 нм, и увеличивается с ростом размера нанокристалла.

4. Энергетический спектр квантовой точки, сформированной между двумя нанесенными на край двумерного топологического изолятора одинаково намагниченными ферромагнитными диэлектрическими полосками, при уменьшении расстояния между ними будет всегда содержать хотя бы пару невырожденных уровней энергии, расположенных симметрично относительно дираковской точки.

Степень достоверности полученных результатов

Достоверность результатов проведенных в работе теоретических исследований обеспечивается оптимальным выбором физических моделей, учитывающих основные свойства исследуемых систем, внутренней непротиворечивостью, согласованностью с существующими в литературе как расчетными, так и экспериментальными данными.

Правильность выводов и согласованность полученных результатов также неоднократно подтверждались при апробации работы.

Апробация результатов работы

Изложенные в диссертации результаты обсуждались автором в период с 2010 по 2016 гг. на семинарах в Национальном исследовательском Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского, Институте радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН (гор. Москва), Амстердамском университете (Нидерланды) и Индийском институте технологии в Джодхпуре, были представлены им как приглашенный доклад на международной конференции “EMN Meeting on Vacuum Electronics” (гор. Лас-Вегас, штат

Невада, США, 2015 г.), а также лично докладывались на 18 международных и 5 всероссийских научных конференциях:

— 31 – 33 Международных конференциях по физике полупроводников “ICPS” (гор. Цюрих, Швейцария, 2012 г.; гор. Остин, штат Техас, США, 2014 г.; гор. Пекин, Китай, 2016 г.);

— 8 Международной конференции по физике и приложениям спиновых явлений в твердых телах “PASPS VIII” (гор. Вашингтон, США, 2014 г.);

— XVI – XX Международных симпозиумах «Нанозеллектроника» (гор. Нижний Новгород, 2012 – 2016 гг.);

— VII, IX и X Международных конференциях по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе «Кремний» (гор. Нижний Новгород, 2010 г.; гор. Санкт-Петербург, 2012 г.; гор. Иркутск, 2014 г.);

— Московском международном симпозиуме по магнетизму “MISM-2014” (гор. Москва, 2014 г.);

— Международной конференции «Магнитный резонанс: фундаментальные исследования и пионерские применения», посвященной 70-летию открытия электронного парамагнитного резонанса Е.К. Завойским (гор. Казань, 2014 г.);

— Международной конференции «Резонансы в конденсированных средах», посвященной столетию со дня рождения профессора С.А. Альтшулера “Alt100” (гор. Казань, 2011 г.);

— 13ом международном междисциплинарном симпозиуме «Порядок, беспорядок и свойства оксидов» ODPO-13 (гор. Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 2010 г.);

— Летней научной школе «Актуальные проблемы физики конденсированного состояния (теория и эксперимент)» Фонда некоммерческих программ «Династия» (пос. Репино, Ленинградская обл., 2013 г.);

— XIV Международной молодежной научной школе «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений» (гор. Казань, 2011 г.);

— XII Российской конференции по физике полупроводников (гор. Звенигород, 2015 г.);

— XI Всероссийской конференции «Молодые ученые России» Фонда некоммерческих программ «Династия» (гор. Москва, 2013 г.);

— XXX научных чтениях имени академика Николая Васильевича Белова (гор. Нижний Новгород, 2011 г.);

— Второй школе молодых ученых по физике наноструктурированных и кристаллических материалов (гор. Нижний Новгород, 2011 г.);

— 1ой Всероссийской научно-инновационной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент» (гор. Тамбов, 2009 г.).

Часть результатов, составивших содержание диссертации, получена автором при поддержке Министерства образования и науки РФ (уникальный идентификатор прикладных научных исследований RFMEFI58414X0008) (Глава 4), при выполнении работ по грантам РФФИ № 12-07-31232-мол_а «Моделирование процессов переноса энергии и спина в массивах кремниевых нанокристаллов» (Глава 2), № 13-02-00717-а «Спиновый хаос и транспорт в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием» (Глава 5), № 15-42-02254-р_поволжье_а «Эффекты примесного спин-зависимого рассеяния в транспорте и спиновом резонансе электронов проводимости в кремнии, легированном сурьмой и висмутом» (Глава 1), а также при поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания (проект № 3.285.2014/К) (Главы 2 и 5).

Результаты диссертационного исследования частично вошли в учебно-методическое пособие [A11].

Личный вклад автора в получение результатов

Автор внес определяющий вклад в получение основных результатов диссертационной работы на всех ее этапах: участвовал в постановке и решении теоретических задач, обосновании применяемых моделей, обсуждении и интерпретации результатов расчетов и приводимых в диссертации экспериментальных данных, а также подготовке работ к печати.

Научные достижения автора

Ценность результатов, изложенных в диссертации, отражена следующими стипендиями и дипломами за достижения в научной деятельности:

— стипендия Президента Российской Федерации для аспирантов, обучающихся по приоритетным направлениям модернизации и технологического развития российской экономики, в 2015/2016 учебном году;

— стипендия Президента Российской Федерации для аспирантов образовательных организаций высшего образования, подведомственных Министерству образования и науки РФ, имеющих государственную аккредитацию, в 2013/2014 и 2014/2015 учебных годах;

— Дипломы за победу в конкурсе Фонда Дмитрия Зимина «Династия» (программа поддержки аспирантов и молодых ученых без степени, 2012 г.; стипендиальная программа, 2010 г.);

— стипендия Нижегородской области для аспирантов им. академика Г.А. Разуваева в 2013–2014, 2014–2015 и 2015–2016 учебных годах;

— стипендия Научно-образовательного центра «Физика твердотельных наноструктур» ННГУ по совместной программе с Американским фондом гражданских исследований и развития «Фундаментальные исследования и высшее образование» в 2010–2011 учебном году;

— Диплом II-ой степени Всероссийской научно-инновационной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент» (гор. Тамбов, 2009 г.).

Публикации

Оригинальные результаты по теме диссертационного исследования представлены в 11 публикациях, из которых 9 – в рецензируемых научных изданиях [A1–A9], в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, 1 – в архиве электронных препринтов научных статей arXiv.org [A10] и 1 учебно-методическое пособие [A11].

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, благодарностей, списка работ автора по теме диссертации, содержащего 11 наименований, перечня сокращений и условных обозначений и списка литературы, содержащего 133 источника. Общий объем диссертации составляет 116 страниц, включая 17 рисунков и 4 таблицы.

Глава 1. Приближение огибающей функции для исследования квантовых состояний в объемных полупроводниках и полупроводниковых структурах

Расчет электронных квантовых состояний в объемных полупроводниках и полупроводниковых структурах является ключевым с точки зрения изучения их транспортных и оптических свойств, знание которых необходимо, в свою очередь, для построения полупроводниковых приборов с заданными характеристиками. В отечественной и мировой литературе развит целый ряд фактически ставших уже классическими подходов к описанию электронных состояний в полупроводниковых системах, которые можно условно разделить на первопринципные и полуэмпирические методы.

Расчеты из первых принципов базируются в настоящее время главным образом на методах теории функционала плотности (ТФП), предложенной в работах В. Кона, П. Хоэнберга и Л. Шэма [28, 29]. Эти расчеты, как правило, обладают достаточно высокой точностью и универсальностью в сравнении с другими методами, однако их применение в ряде важных случаев может быть осложнено. Во-первых, использование ТФП для расчета локализованных состояний в наноструктурах требует большого времени компьютерного счета, так что ее применение затруднено для систем с характерными размерами более 3 нм. Во-вторых, традиционно используемые в рамках ТФП обменно-корреляционные функционалы содержат в себе нефизичный член самовоздействия, фактически обусловленный тем, что теория включает в себя взаимодействие электрона с собственным электростатическим полем [30]. Такое «самоотталкивание» приводит к делокализации состояний. Типичный связанный с этим артефакт первопринципных расчетов – уменьшение ширины запрещенной зоны полупроводников при расчете их энергетической структуры [31]. Аналогичный результат получается и при анализе электронных свойств наноструктур [32].

Существует достаточно много подходов к преодолению этой трудности в рамках ТФП. Первый и самый очевидный путь состоит в явном исключении члена самовоздействия из функционала обмена и корреляции [30]. Тем не менее, этот подход сопряжен с дополнительными вычислительными затратами. Второй путь базируется на использовании приближения М. Касиды, в рамках которого поправки к энергиям возбужденных состояний строятся на основе динамической диэлектрической восприимчивости системы [33]. К недостаткам этого подхода стоит отнести применимость только к системам конечного размера, а также необходимость адаптации численных алгоритмов для работы с неэрмитовыми матрицами. Кроме того, проблема запрещенной зоны в ТФП решается с помощью использования гибридных обменно-корреляционных функционалов [34, 35]. Тем не менее такие функционалы не являются истинными: они подбираются с «прицелом» на конкретные системы,

в связи с чем их применимость ограничена, а в теорию приходится вводить эмпирические параметры.

В связи с ограниченной применимостью первопринципных подходов широкое распространение имеют полуэмпирические методы расчета электронных состояний, основные из которых – метод сильной связи [36], используемый в настоящее время и для изучения квантовых состояний в системах, содержащих $\sim 10^6$ атомов [37], метод эмпирического псевдопотенциала [38], применимый к структурам, состоящим из $\sim 10^5$ атомов [39], и приближение огибающей функции [40], фактически не чувствительный к увеличению размера полупроводниковой системы.

При решении задач, поставленных в диссертационном исследовании, будет использоваться приближение огибающей функции, поскольку оно обладает рядом ценных преимуществ по сравнению с другими подходами. В частности: оно, как правило, не требует применения затратных процедур численного счета, главным образом, диагонализации больших матриц; для выполнения расчетов необходим обычно лишь небольшой набор эмпирических данных; могут быть эффективно использованы соображения симметрии [41]. Приближение огибающей функции позволяет исследовать спектр системы в присутствии широкого класса внешних воздействий (электромагнитное поле, механические напряжения, обменное взаимодействие). Все это, в конечном счете, делает возможным его использование для изучения квантовых состояний электронов и дырок в самом широком классе полупроводниковых структур, в т.ч. и в присутствии внешних полей.

Исторически возникновение метода огибающей функции связано с работой Г. Х. Ваннье [42], в которой посредством разложения по базису «атомных» функций (функций Ваннье в современной терминологии [43]) была решена задача об уровнях энергии электрона, возбужденного из заполненной блоховской зоны и взаимодействующего посредством кулоновского притяжения с возникшей на его месте дыркой. В дальнейшем было предложено обобщение метода для решения уравнения Шредингера в неидеальном кристалле в представлении функций Блоха [44].

В данном диссертационном исследовании не ставилось задачи развития метода огибающей функции, оно необходимо в качестве удобного и надежного инструмента для определения квантовых состояний электронов и дырок в широком классе полупроводниковых структур. В связи с этим изложение метода будет дано лишь в требуемом для решения поставленных задач объеме, следуя классической работе В. Кона и Дж. М. Латтинжера [45]. В свою очередь достаточно обширный обзор работ по приближению огибающей функции можно найти, например, в книге [46].

1.1. Приближение огибающей функции: постановка задачи

Попытаемся определить стационарные состояния валентного блоховского электрона в кристалле с макроскопическим объемом W , содержащем G элементарных ячеек с объемом Ω_0 каждая, во внешнем постоянном во времени и пространственно неоднородном электромагнитном поле с точностью до членов, обратно пропорциональных квадрату скорости света c . Для этого требуется решить уравнение Шредингера-Паули

$$\left(\frac{1}{2m_0} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e_0}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2}{8m_0^3 c^2} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V_0(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \Delta V_0(\mathbf{r}) + \right. \\ \left. + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla U(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \Delta U(\mathbf{r}) + \frac{g_0}{2} \mu_B \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right) \Phi(\mathbf{r}) = E \Phi(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор частицы, $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ – оператор импульса, $V_0(\mathbf{r})$ – периодический кристаллический потенциал, $U(\mathbf{r})$ – скалярная потенциальная энергия электрона во внешнем (по отношению к кристаллическому) постоянном во времени пространственно неоднородном электрическом поле, включающая в себя обменно-корреляционное слагаемое, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – векторный потенциал внешнего стационарного пространственно неоднородного магнитного поля $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$, удовлетворяющий калибровочному условию Кулона, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ – вектор Паули, компоненты которого равны матрицам Паули $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$, $\Phi(\mathbf{r})$ – волновая функция электрона, представляющая собой нетривиальный двухкомпонентный спинор, E – энергия стационарного состояния, $-e_0$, m_0 и g_0 – заряд, масса и фактор Ландэ свободного электрона, $g_0 \approx 2.002319$, \hbar – постоянная Планка, $\mu_B = \frac{e_0 \hbar}{2m_0 c}$ – магнетон Бора. Подчеркнем, что в данной формулировке электростатическая составляющая внешнего электромагнитного поля не связана линейно с энергией $U(\mathbf{r})$, поскольку последняя содержит в себе члены обмена и корреляции. На границах кристалла $\Phi(\mathbf{r})$ удовлетворяет периодическим условиям Борна-Кармана и нормирована на единицу в его объеме:

$$\int_W d\mathbf{r} |\Phi|^2(\mathbf{r}) = \int_W d\mathbf{r} \Phi^+(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) = 1. \quad (1.2)$$

Внешнее электромагнитное поле полагается слабым в том смысле, что оно не искажает зонную структуру материала: характерные энергии связанных состояний валентных электронов во внешнем поле малы в сравнении с характерными энергиями связи остовных электронов в кристалле ($\sim 10^{-2} \div 1$ эВ в сравнении с $\sim 10 \div 100$ эВ). Следовательно, волновую функцию

будем искать в виде разложения по блоховским функциям электрона в идеальном кристалле [47]:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n j m_j}(\mathbf{k}) \psi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n j m_j}(\mathbf{k}) u_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}), \quad (1.3)$$

где $\psi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r})$ и $u_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r})$ – соответственно блоховская функция и блоховская амплитуда квантового состояния валентного электрона энергетической зоны с номером n , характеризуемого квазиволновым вектором \mathbf{k} , расположенным в первой зоне Бриллюэна ($\mathbf{k} \in B.z.$), квантовым числом полного момента j и квантовым числом проекции полного момента m_j , а коэффициенты разложения $\phi_{n j m_j}(\mathbf{k})$ могут быть выражены как

$$\phi_{n j m_j}(\mathbf{k}) = \int_W d\mathbf{r} \psi_{n \mathbf{k} j m_j}^+(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) = \int_W d\mathbf{r} \exp(-i \mathbf{k} \mathbf{r}) u_{n \mathbf{k} j m_j}^+(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}). \quad (1.4)$$

Блоховские функции $\psi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r})$ на границах кристалла также удовлетворяют периодическим условиям Борна-Кармана и нормированы на единицу по его объему.

1.2. Полнозонное приближение огибающей функции

Уравнение (1.1) является довольно громоздким. Решим сначала задачу в простом частном случае нулевого векторного потенциала в пренебрежении релятивистскими поправками. Гамильтониан электрона тогда примет вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

а волновая функция (в данном случае скалярная) может быть записана как

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n \nu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n \nu}(\mathbf{k}) \psi_{n \mathbf{k} \nu}(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n \nu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n \nu}(\mathbf{k}) u_{n \mathbf{k} \nu}(\mathbf{r}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}), \quad (1.6)$$

где ν – индекс собственной функции при наличии вырождения в точке с квазиволновым вектором \mathbf{k} энергетической зоны с номером n . Уравнение Шредингера для стационарных состояний примет вид:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{n \nu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n \nu}(\mathbf{k}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) u_{n \mathbf{k} \nu}(\mathbf{r}) + \\ & + \sum_{\substack{n \nu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n \nu}(\mathbf{k}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}) U(\mathbf{r}) u_{n \mathbf{k} \nu}(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n \nu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \phi_{n \nu}(\mathbf{k}) \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}) E u_{n \mathbf{k} \nu}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Непосредственное решение уравнения (1.7) относительно коэффициентов разложения $\phi_{n \nu}(\mathbf{k})$ является затруднительным, поскольку результат действия невозмущенного оператора

Гамильтона $\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r})$ на периодическую часть блоховской функции $u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r})$ не известен. Для преодоления этой трудности блоховские амплитуды $u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r})$ разложим по базису функций $u_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r})$, отвечающих точке Γ зоны Бриллюэна ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$):

$$u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r}) = \sum_{m\mu} C_{m\mu nv}(\mathbf{k}) \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}). \quad (1.8)$$

В (1.8) уже учтено, что в центре зоны Бриллюэна блоховские функции совпадают со своими периодическими частями. Результат действия невозмущенного гамильтониана на блоховскую функцию центра зоны Бриллюэна известен:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right) \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}) = E_{m\mu}(\mathbf{0}) \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}), \quad (1.9)$$

где $E_{m\mu}(\mathbf{0})$ – энергия частицы в точке $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ энергетической зоны с номером m , а наличие индекса μ характеризует вырождение зоны.

Введем обозначение

$$\sum_{nv} C_{m\mu nv}(\mathbf{k}) \phi_{nv}(\mathbf{k}) \equiv F_{m\mu}(\mathbf{k}), \quad (1.10)$$

тогда уравнение (1.7) примет вид:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{m\mu}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right) u_{m\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) + \\ & + \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{m\mu}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) u_{m\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{m\mu}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) E u_{m\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.11)$$

а волновая функция может быть записана как

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{m\mu}(\mathbf{k}) \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (1.12)$$

Функции

$$\psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \equiv \chi_{m\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}), \quad (1.13)$$

где $\mathbf{k} \in B.z.$, называют *функциями Кона-Латтинджерса* (или, для сокращения записи, *функциями К.-Л.*). Они удовлетворяют периодическим граничным условиям на поверхности кристалла и образуют ортонормированный базис [45] (последнее обстоятельство позволяет производить разложение $\Phi(\mathbf{r})$ по функциям К.-Л.). Коэффициенты разложения волновой функции по функциям К.-Л.

$$F_{m\mu}(\mathbf{k}) = \int_W d\mathbf{r} \chi_{m\mathbf{k}\mu}^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

называют *огibaющими функциями* в импульсном представлении, или просто *огibaющими*. Огibaющие в импульсном представлении удовлетворяют условию нормировки на единицу:

$$\sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} |F_{m\mu}(\mathbf{k})|^2 = \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{m\mu}^*(\mathbf{k}) F_{m\mu}(\mathbf{k}) = 1. \quad (1.15)$$

Умножая уравнение (1.11) на функцию, сопряженную к $\chi_{l\eta}(\mathbf{r})$, $\mathbf{q} \in B.z.$, и интегрируя по объему кристалла, получим

$$\sum_{m\mu} H_{l\eta m\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) F_{m\mu}(\mathbf{q}) + \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) F_{m\mu}(\mathbf{k}) = E F_{l\eta}(\mathbf{q}), \quad (1.16)$$

где

$$H_{l\eta m\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) = \delta_{lm} \delta_{\eta\mu} E_{m\mu}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{l\eta m\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} + \delta_{lm} \delta_{\eta\mu} \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_0} \quad (1.17)$$

есть $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониан электрона в идеальном кристалле, являющийся функцией квазиволнового вектора,

$$\bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{q}-\mathbf{k}) = \int_w d\mathbf{r} \exp(-i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\mathbf{r}) (\psi_{l\eta}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{m\mu}(\mathbf{r})), \quad (1.18)$$

а δ_{lm} означает символ Кронекера.

Уравнение (1.16) может быть рассмотрено как уравнение на собственные векторы и собственные значения эрмитовой матрицы

$$H_{l\eta m\mu}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}} H_{l\eta m\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) + \bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{q}-\mathbf{k}), \quad (1.19)$$

где $\mathbf{q}, \mathbf{k} \in B.z.$. Его решение эквивалентно решению исходной задачи определения волновой функции и энергетического спектра блоховского электрона в присутствии внешнего скалярного потенциала. В частном случае $U(\mathbf{r})=0$ (идеальный кристалл) уравнение (1.16) является основным уравнением *полнозонного $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -метода* [46], позволяющего определить квантовые состояния в произвольной точке \mathbf{k} зоны Бриллюэна. В этой связи сформулированный здесь метод огibaющей функции позволяет точно определить вклад в $\Phi(\mathbf{r})$ функций К.-Л., связанных со всеми точками зоны Бриллюэна, поэтому его уместно назвать *полнозонным приближением огibaющей*.

В ненулевом внешнем поле, однако, для решения уравнения (1.16) перейдем обратно в координатное представление. Для этого сначала распространим определение огibaющих $F_{m\mu}(\mathbf{k})$ на все обратное пространство, используя его периодичность:

$$F_{m\mu}(\mathbf{k} + \mathbf{g}_f) = F_{m\mu}(\mathbf{k}), \quad (1.20)$$

где \mathbf{g}_f – трансляционный вектор обратной решетки, в котором целочисленный вектор $\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)$ определяет узел обратной решетки. Выполним дискретное преобразование Фурье периодической функции (1.18):

$$F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) = \sum_{\mathbf{k} \in B.z.} F_{m\mu}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{a}_1 \mathbf{k}), \quad (1.21)$$

где \mathbf{a}_1 – вектор трансляции в реальном пространстве, в котором вектор $\mathbf{l} = (l_1, l_2, l_3)$ с целочисленными компонентами определяет узел кристаллической решетки. Поскольку кристалл содержит ограниченное число элементарных ячеек G , то все векторы \mathbf{l} являются элементами конечного множества M_G . Функции $F_{m\mu}(\mathbf{a}_1)$ есть огибающие в координатном представлении.

Обратное дискретное преобразование Фурье, позволяющее перейти от огибающих в координатном представлении (1.21) к огибающим в импульсном представлении (1.20) имеет вид:

$$F_{m\mu}(\mathbf{k}) = \frac{1}{G} \sum_{\mathbf{l} \in M_G} F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) \exp(-i\mathbf{a}_1 \mathbf{k}). \quad (1.22)$$

Его применение к (1.15) в совокупности с (1.21) позволяет записать условие нормировки огибающих в координатном представлении:

$$\sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{l} \in M_G}} |F_{m\mu}(\mathbf{a}_1)|^2 = \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{l} \in M_G}} F_{m\mu}^*(\mathbf{a}_1) F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) = G. \quad (1.23)$$

Волновая функция может быть записана через $F_{m\mu}(\mathbf{a}_1)$ как

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{m\mu} \left(\frac{1}{G} \sum_{\mathbf{l} \in M_G} \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) \right) \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}), \quad (1.24)$$

где ядро $\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1)$ определяется равенством

$$\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) = \sum_{\mathbf{k} \in B.z.} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1)), \quad (1.25)$$

являясь действительной четной функцией аргумента $\mathbf{r} - \mathbf{a}_1$.

Выполнив теперь дискретное преобразование Фурье уравнения (1.16), запишем

$$\sum_{m\mu} H_{l\eta m\mu}^{(0)} \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}_1} \right) F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) + \sum_{m\mu} \bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{a}_1) F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) = E F_{l\eta}(\mathbf{a}_1), \quad (1.26)$$

где

$$\bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{a}_1) = \int_W d\mathbf{r}' \Delta(\mathbf{a}_1 - \mathbf{r}') (\psi_{l\mathbf{0}\eta}^*(\mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}')), \quad (1.27)$$

а $H_{l\eta m\mu}^{(0)} \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathbf{a}_1} \right)$ получено из $H_{l\eta m\mu}^{(0)}(\mathbf{k})$ тривиальной заменой аргумента.

Уравнение (1.26) является дифференциальным уравнением в частных производных на дискретной сетке – кристаллической решетке, – содержащей G узлов. В макроскопических образцах $G \sim 10^{23}$, так что решение уравнения (1.26) в случае произвольного скалярного потенциала становится фактически невозможным. От (1.26) перейдем к уравнению в пространстве функций непрерывной переменной, решение которого может быть найдено по крайней мере, в принципе:

$$\sum_{m\mu} \hat{H}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r}) f_{m\mu}(\mathbf{r}) = E f_{l\eta}(\mathbf{r}), \quad (1.28)$$

где

$$\hat{H}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r}) = \hat{H}_{l\eta m\mu}^{(0)}(-i\nabla) + \bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$

есть эрмитов дифференциальный оператор второго порядка, поэтому уравнение (1.28) является уравнением шредингеровского типа для определения собственных функций $f_{l\eta}(\mathbf{r})$ и собственных значений E оператора (1.29). В этой связи оператор (1.29) называют *эквивалентным* или *эффективным гамильтонианом* в реальном пространстве. Пространственно однородный оператор $\hat{H}_{l\eta m\mu}^{(0)}(-i\nabla)$, полученный из (1.17) заменой квазиволнового вектора \mathbf{q} на $-i\nabla$, имеет смысл оператора эффективной кинетической энергии, а матрица $\bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r})$ – эффективной потенциальной энергии. Собственные функции оператора $\hat{H}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r})$ удовлетворяют условию нормировки вида

$$\sum_{m\mu} \int_{\mathcal{W}} d\mathbf{r} |f_{m\mu}|^2(\mathbf{r}) = 1. \quad (1.30)$$

Огибающие $F_{m\mu}(\mathbf{a}_1)$ связаны с собственными функциями $f_{m\mu}(\mathbf{r})$ эффективного гамильтониана соотношением

$$F_{m\mu}(\mathbf{a}_1) = \frac{f_{m\mu}(\mathbf{r} = \mathbf{a}_1) \sqrt{G}}{\sqrt{\sum_{\substack{n\nu \\ \mathbf{l} \in M_G}} |f_{n\nu}|^2(\mathbf{r} = \mathbf{a}_1)}}, \quad (1.31)$$

откуда волновая функция принимает вид

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{m\mu} \left[\frac{1}{\sqrt{G \sum_{\substack{n\nu \\ \mathbf{l} \in M_G}} |f_{n\nu}|^2(\mathbf{r} = \mathbf{a}_1)}} \sum_{\mathbf{l} \in M_G} \Delta(\mathbf{a}_1 - \mathbf{r}) f_{m\mu}(\mathbf{r} = \mathbf{a}_1) \right] \psi_{m\mathbf{0}\mu}(\mathbf{r}). \quad (1.32)$$

Оператор (1.29), чьи собственные значения определяют энергетический спектр электрона в неидеальном кристалле, и волновая функция (1.32) зависят от интегрального ядра

$\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, в котором ввиду большого числа элементарных ячеек в кристалле суммирование заменим интегрированием:

$$\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{W}{(2\pi)^3} \int_{B.z.} d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')). \quad (1.33)$$

В пределе $\Omega_0 \rightarrow 0$ объем зоны Бриллюэна $\frac{(2\pi)^3}{\Omega_0}$ стремится к бесконечности, тогда справедлив предельный переход

$$\int_{B.z.} d\mathbf{k} \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \xrightarrow{\Omega_0 \rightarrow 0} (2\pi)^3 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.34)$$

где $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ – дельта-функция Дирака 3D аргумента. Случай $\Omega_0 \rightarrow 0$ соответствует ситуации, когда $W = \text{const}$, а $G \rightarrow \infty$. Для $G \sim 10^{23}$ такой предельный переход выполняется с высокой точностью, поэтому

$$\Delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx W\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.35)$$

и эффективная потенциальная энергия принимает вид

$$\bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r}) \approx (\sqrt{W}\psi_{l0\eta}(\mathbf{r}))^* U(\mathbf{r})(\sqrt{W}\psi_{m0\mu}(\mathbf{r})), \quad (1.36)$$

а волновая функция

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx \sum_{m\mu} f_{m\mu}(\mathbf{r})(\sqrt{W}\psi_{m0\mu}(\mathbf{r})), \quad (1.37)$$

где $\sqrt{W}\psi_{m0\mu}(\mathbf{r})$ есть блоховские функции, отвечающие центру зоны Бриллюэна в неограниченном кристалле.

Итак, задача определения собственных функций и собственных значений истинного гамильтониана (1.5) сводится к решению спектральной задачи с эффективным матричным гамильтонианом (1.29), в котором оператор кинетической энергии определяется только кристаллическим полем, а потенциальная энергия имеет вид (1.36) и обусловлена как внешним полем, так и периодическим потенциалом – через собственные функции электрона в нем. Заметим, что в [45] эффективная потенциальная энергия определена как

$$\bar{U}_{l\eta m\mu}(\mathbf{r}) \approx \delta_{lm}\delta_{\eta\mu} U(\mathbf{r}), \quad (1.38)$$

что достигалось за счет положения о «плавности» (“gentle” в терминологии авторов работы) внешнего потенциала. Полученное в этом параграфе выражение (1.36) справедливо, строго говоря, для произвольного скалярного потенциала, без каких-либо предположений о виде его зависимости от координаты. На то, что эффективная потенциальная энергия в методе огибающей имеет вид, подобный (1.36), указывалось ранее в [48, 49].

Базисные функции К.-Л., по которым выполнялось разложение волновой функции, отвечают бесконечному числу энергетических зон идеального кристалла, в связи с чем

гамильтониан (1.29) представляет собой бесконечно-рядную квадратную матрицу, так что решение уравнения (1.28) в текущей постановке все еще является невыполнимой задачей. Рассмотрим подходы к его приближенному решению.

1.3. Переход к одно- и многозонным эквивалентным гамильтонианам

Для различных приложений часто требуется отыскать квантовые состояния полупроводниковой системы лишь в сравнительно небольшом энергетическом диапазоне, включающем запрещенную зону, дно зоны проводимости и потолок валентной зоны объемного полупроводника. Зоны с энергиями, заметно отличными от искомым, вносят малый вклад в решение задачи, в связи с чем соответствующими им функциями К.-Л. в $\Phi(\mathbf{r})$ можно пренебречь. В этом случае эквивалентный гамильтониан (1.28) принимает вид N_{bb} -рядной квадратной матрицы, где N_{bb} – число блоховских функций точки Γ зоны Бриллюэна, которые остаются в рассмотрении. Такой подход лежит в основе построения *многозонных $k\cdot p$ -гамильтонианов* [46], где взаимодействие между N_{bb} блоховскими состояниями центра зоны Бриллюэна, ближайшими к исследуемому диапазону энергий, учитывается точно, а взаимодействием с остальными пренебрегается. Заметим, что в отношении эквивалентных гамильтонианов термин «полнозонный» никак не связан с термином «многозонный». В первом случае речь идет об описании состояний во всей, «полной» зоне Бриллюэна, во втором – о гамильтониане, включающем взаимодействие нескольких, «многих» энергетических зон.

Описанный выше способ перехода к многозонному эквивалентному гамильтониану, позволяющий, конечно, принципиально решить задачу, обладает в ряде случаев существенными недостатками. Во-первых, требуется или рассчитать, например, из первых принципов, или определить на основе анализа экспериментальных данных большое количество параметров $k\cdot p$ -гамильтониана, что может быть само по себе трудоемкой задачей. Во-вторых, решение системы дифференциальных уравнений в частных производных (1.28) может быть затруднительным, например, когда истинный внешний потенциал $U(\mathbf{r})$ полагается сферически симметричным. Тем не менее, несмотря на указанные недостатки, применение этого метода оказывается особенно удобным для электронов на поверхности 3D или краю 2D ТИ, где можно, во-первых, оставить в рассмотрении только две зоны, образующие конус Дирака (двухзонное приближение – $N_{bb} = 2$), и, во-вторых, даже пренебречь квадратичным слагаемым в $k\cdot p$ -гамильтониане [50]. В дальнейшем для построения эффективного гамильтониана на краю 2D ТИ воспользуемся именно таким подходом.

В [45] был предложен более универсальный способ решения задачи. Он состоит в том, что в $\Phi(\mathbf{r})$ точно учитывается лишь вклад от базисных функций, которые непосредственно относятся к той зоне (валентной или проводимости), вблизи которой необходимо рассчитать энергию квантового состояния, а вклад всех остальных зон учитывается по теории возмущений. При этом в $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониане сохраняется лишь небольшое число эмпирических параметров, характеризующих только одну зону (валентную или проводимости). Такой $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониан называют однозонным.

Как описано в [45], выполним переход к однозонному эффективному гамильтониану от полнозонного посредством канонического преобразования матрицы (1.19) для произвольной пары квазиволновых векторов $\mathbf{q}, \mathbf{k} \in B.z.$. Процедура канонического преобразования, исключая недиагональные блоки эрмитовой матрицы, подробно описана, например, в [41]. Здесь приведем только результат вычисления диагональных блоков преобразованной матрицы:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx & \delta_{\eta\mu} \left(E_{l\mu}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_0} \right) \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{l\eta l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}} + \bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) + \\ & + \sum_{n \neq l} \frac{1}{E_l - E_n} \sum_{\mathbf{q}' \in B.z.} \left(\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{l\eta n\nu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} + \bar{U}_{l\eta n\nu}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \right) \left(\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{n\nu l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q}' \delta_{\mathbf{q}'\mathbf{k}} + \bar{U}_{n\nu l\mu}(\mathbf{q}' - \mathbf{k}) \right). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Далее учтем малость величин $|\bar{U}_{l\eta n\nu}(\mathbf{q} - \mathbf{k})|$, где $\mathbf{q}, \mathbf{k} \in B.z.$, в сравнении с $|E_l - E_n|$ для $n \neq l$, тогда

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx & \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}} \left(\delta_{\eta\mu} \left(E_{l\mu}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_0} \right) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{l\eta l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} + \right. \\ & \left. + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left(\sum_{n \neq l} \frac{(\mathbf{p}_{l\eta n\nu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q})(\mathbf{p}_{n\nu l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q})}{E_l - E_n} \right) \right) + \bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{k}). \end{aligned} \quad (1.40)$$

Выражение (1.40) может быть переписано в виде:

$$\tilde{H}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \approx \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}} \tilde{H}_{l\eta l\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) + \bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{k}), \quad (1.41)$$

где

$$\tilde{H}_{l\eta l\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) = \delta_{\eta\mu} \left(E_{l\mu}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m_0} \right) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{p}_{l\eta l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left(\sum_{n \neq l} \frac{(\mathbf{p}_{l\eta n\nu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q})(\mathbf{p}_{n\nu l\mu}(\mathbf{0}) \cdot \mathbf{q})}{E_l - E_n} \right) \quad (1.42)$$

есть однозонный $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониан, отвечающий энергетической зоне с номером l , записанный с точностью до второго порядка по квазиволновому вектору \mathbf{q} . Огибающие в импульсном представлении могут быть найдены как собственные векторы матрицы (1.41):

$$\sum_{\mu} \tilde{H}_{l\eta l\mu}^{(0)}(\mathbf{q}) F_{l\mu}(\mathbf{q}) + \sum_{\substack{\mu \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) F_{l\mu}(\mathbf{k}) = E F_{l\eta}(\mathbf{q}). \quad (1.43)$$

Уравнение (1.43) имеет тот же вид, что и (1.16), с заменой полнозонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана (1.17) на однозонный (1.42).

В принципе, матрица (1.42) не обязательно должна соответствовать именно одной энергетической зоне. В ряде случаев приходится выделять в один блок матрицы (1.19) элементы, отвечающие нескольким близким зонам (например, валентной и зоне проводимости), тем самым учитывая их взаимодействие точно, а связь с другими зонами – по теории возмущений. В результате, при одном и том же l значения $E_{l\mu}(\mathbf{0})$ могут быть различны для разных μ , а сам $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан (1.42) будет являться многозонным, однако в нем, в отличие от обсуждавшихся выше многозонных гамильтонианов, взаимодействием с остальными зонами не пренебрегается. Процедуру перехода от полнозонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана к многозонному в этом случае ассоциируют с методом возмущений Лёвдина [51]. Кроме того, можно комбинировать различные подходы к построению одно- и многозонных $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтонианов, например, получать однозонный гамильтониан посредством канонического преобразования не из полнозонного (1.19), а из многозонного типа (1.42), точно учитывающего ту зону, вклад которой необходимо сохранить.

По своей структуре (1.43) ничем не отличается от (1.16), так что уравнение в реальном пространстве имеет вид:

$$\sum_{\mu} \hat{H}_{l\eta l\mu}(\mathbf{r}) f_{l\mu}(\mathbf{r}) = E f_{l\eta}(\mathbf{r}), \quad (1.44)$$

где

$$\hat{H}_{l\eta l\mu}(\mathbf{r}) = \hat{H}_{l\eta l\mu}^{(0)}(-i\nabla) + \bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{r}) \quad (1.45)$$

представляет собой одно- или многозонный эквивалентный гамильтониан. Если согласно [45] положить

$$\bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{r}) = \delta_{\eta\mu} U(\mathbf{r}), \quad (1.46)$$

то решение исходной задачи сводится к простому алгоритму: в $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониане (1.42) \mathbf{q} заменяется на $-i\nabla$, а истинный внешний потенциал просто аддитивно добавляется к элементам главной диагонали оператора $\hat{H}_{l\eta l\mu}^{(0)}(-i\nabla)$.

Размерность матрицы (1.42), а вместе с ней и эффективного гамильтониана (1.45) зависит, во-первых, от числа энергетических зон, принимаемых в рассмотрение точно, и, во-вторых, от размерности неприводимых представлений, по которым преобразуются блоховские функции, отвечающие экстремумам этих зон. Если в (1.42) точно учитывается только одна зона, то про эквивалентный гамильтониан (1.45) в этом случае, как правило, говорят как о гамильтониане в *приближении эффективной массы* [45].

1.4. Приближение огибающей функции в многодолинном полупроводнике

В некоторых полупроводниках валентная зона и зона проводимости устроены так, что экстремумы одной из них (как правило, зоны проводимости) или даже обеих расположены не в центре зоны Бриллюэна. Это характерно, в частности, для Si, где 6 минимумов зоны проводимости расположены на направлениях Δ обратного пространства вблизи граничных точек X зоны Бриллюэна. В этом случае процедура, проделанная в параграфе 1.2, требует модификации.

Разобьем всю зону Бриллюэна на S равных по объему частей, которые назовем секторами. Объем каждого из S секторов зоны Бриллюэна равен $(2\pi)^3/\Omega_0 S$. Секторы будем обозначать Ξ_a , где a изменяется от 1 до S . В этом случае разложение (1.6) волновой функции может быть переписано как

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{nv \\ \mathbf{k} \in \Xi_a}} \phi_{nv}(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{nv \\ \mathbf{k} \in \Xi_a}} \phi_{nv}(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (1.47)$$

В каждом из секторов Ξ_a выберем некоторую точку \mathbf{k}_a , по базису периодических частей блоховских функций которой будем разлагать функции $u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r})$ с $\mathbf{k} \in \Xi_a$:

$$u_{n\mathbf{k}v}(\mathbf{r}) = \sum_{m\mu} C_{m\mu nv}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) u_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r}). \quad (1.48)$$

Точки \mathbf{k}_a обычно выбирают так, чтобы они совпадали с положениями экстремумов зон или с точками высокой симметрии. В этом смысле нижний индекс « a » нумерует долины. Подставив (1.48) в $\Phi(\mathbf{r})$, а также введя обозначение

$$\sum_{nv} C_{m\mu nv}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) \phi_{nv}(\mathbf{k}) \equiv F_{m\mu}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a), \quad (1.49)$$

получим

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in \Xi_a}} F_{m\mu}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) \psi_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a)\mathbf{r}). \quad (1.50)$$

Это выражение представляет собой разложение волновой функции по функциям $\psi_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a)\mathbf{r})$, которые являются обобщением функций К.-Л. на случай выбора начала отсчета квазиволнового вектора в некоторой произвольной точке зоны Бриллюэна \mathbf{k}_a . Будем далее называть их *обобщенными функциями К.-Л.* и обозначать

$$\zeta_{m\mathbf{k}_a\mu}^{(a)}(\mathbf{r}) = \psi_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r}) \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a)\mathbf{r}), \quad (1.51)$$

где $\mathbf{k} \in \Xi_a$. Традиционные функции К.-Л. являются частным случаем обобщенных при единственном значении a с $\mathbf{k}_a = \mathbf{0}$ и $\mathbf{k} \in B.z.$. Функции $\zeta_{m\mathbf{k}\mu}^{(a)}(\mathbf{r})$, как и $\chi_{m\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r})$, на границах кристалла удовлетворяют периодическим условиям Борна-Кармана. Условие ортогональности обобщенных функций К.-Л. имеет вид:

$$\int_W d\mathbf{r} (\zeta_{l\mathbf{q}\eta}^{(b)}(\mathbf{r}))^* \zeta_{m\mathbf{k}\mu}^{(a)}(\mathbf{r}) = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \delta_{lm} \delta_{ab} \delta_{\eta\mu}, \quad (1.52)$$

где $\mathbf{k} \in \Xi_a$ и $\mathbf{q} \in \Xi_b$.

Результат действия гамильтониана (1.5) на функцию (1.50) имеет вид:

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in \Xi_a}} F_{m\mu}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) \exp(i(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a)\mathbf{r}) \left(E_{m\mu}(\mathbf{k}_a) + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a)^2}{2m_0} \right) \psi_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r}) + \\ + \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in \Xi_a}} F_{m\mu}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) U(\mathbf{r}) \zeta_{m\mathbf{k}\mu}^{(a)}(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^S \sum_{\substack{m\mu \\ \mathbf{k} \in \Xi_b}} F_{m\mu}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_a) E \zeta_{m\mathbf{k}\mu}^{(a)}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.53)$$

Для перехода от (1.53) к уравнению типа (1.16) необходимо умножить (1.53) на функцию, сопряженную $\zeta_{l\mathbf{q}\eta}^{(b)}(\mathbf{r})$, где $\mathbf{q} \in \Xi_b$, и проинтегрировать по объему кристалла. При этом первое слагаемое в левой части уравнения диагонально по долинному индексу и элементарно сводится к произведению полнозонного $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана, полученного вблизи одной из долин, на соответствующие огибающие в импульсном представлении, а во втором будут возникать матричные элементы $\int_W d\mathbf{r} (\zeta_{l\mathbf{q}\eta}^{(b)}(\mathbf{r}))^* U(\mathbf{r}) \zeta_{m\mathbf{k}\mu}^{(a)}(\mathbf{r})$, приводящие, в частности, к «перепутыванию» огибающих, отвечающих различным долинам. Такие матричные элементы описывают междолинное смешивание, которое существенно, если истинный потенциал $U(\mathbf{r})$ заметно отличается от «плавного», другими словами, если в системе есть короткодействующие поля типа примесных [52] или обусловленные атомарно резкими интерфейсами [53].

В диссертационном исследовании не рассматриваются спектральные задачи с эффектами междолинного смешивания. В результате, исключая междолинные матричные элементы из рассмотрения, получим S независимых уравнений типа (1.16), которые будут описывать S -кратно вырожденное (по долинам) состояние квантовой системы. Переход в координатное представление приведет к S независимым уравнениям типа (1.28), в каждом из которых оператор эффективной кинетической энергии получается посредством замены в $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониане, построенном вблизи a -ой долины, квазиволнового вектора на оператор $-i\nabla$, а эффективная потенциальная энергия будет равна $\psi_{l\mathbf{k}_a\eta}(\mathbf{r})U(\mathbf{r})\psi_{m\mathbf{k}_a\mu}(\mathbf{r})$. В предельном случае (1.38) это выражение будет одинаковым для всех долин. Каждое из S уравнений типа (1.28) может быть независимо от остальных приведено к форме (1.44).

1.5. Приближение огибающей функции при учете релятивистских поправок

Теперь обобщим процедуру, проведенную в 1.2, учтя релятивистские поправки с точностью до членов $\propto 1/c^2$. Гамильтониан электрона имеет вид:

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta U(\mathbf{r}), \quad (1.54)$$

где

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2 \hat{\mathbf{p}}^2}{8m_0^3c^2} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\nabla V_0 \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta V_0(\mathbf{r}) \quad (1.55)$$

– оператор Гамильтона блоховского электрона в идеальном кристалле при учете релятивистских поправок, а слагаемые $\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ и $\frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta U$ позволяют принять во внимание релятивистские поправки, связанные с внешним полем. Разложим $\Phi(\mathbf{r})$ по спин-зависимым функциям К.-Л.:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{n j m_j}(\mathbf{k}) \chi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}), \quad (1.56)$$

где

$$\chi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}) = \psi_{n \mathbf{0} j m_j}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \quad (1.57)$$

обладает всеми свойствами скалярных функций (1.13). Подействовав оператором (1.54) на функцию (1.56), получим:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{n j m_j}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \left(E_{n j m_j}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{m_0 c^2} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right)^2 + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \cdot \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \left(\frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_0} \right)^2 \right) \right) \psi_{n \mathbf{0} j m_j}(\mathbf{r}) + \\ & + \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{n j m_j}(\mathbf{k}) \left(U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla U] \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) \chi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}) = \\ & = \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} F_{n j m_j}(\mathbf{k}) E \chi_{n \mathbf{k} j m_j}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.58)$$

где

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} \left(1 - \frac{1}{m_0 c^2} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} \right) + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla V_0] \quad (1.59)$$

представляет собой оператор импульса с учетом релятивистских поправок, а

$$\delta\hat{\pi} = \hat{\pi} - \hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}} \left(-\frac{1}{m_0 c^2} \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} \right) + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} [\hat{\mathbf{g}} \times \nabla V_0] \quad (1.60)$$

есть оператор релятивистских поправок к импульсу.

Наибольшие затруднения для дальнейшего анализа вносит учет релятивистских поправок, связанных с внешним потенциалом. Например, в классической отечественной монографии [41] при обсуждении метода огибающей функции они просто не принимаются во внимание, а в современной книге [54] известного американско-немецкого специалиста Р. Винклера указано, что СОВ, порожденным внешним потенциалом $U(\mathbf{r})$, можно пренебречь по сравнению с кристаллическим СОВ ввиду того, что последнее обусловлено сильным кулоновским потенциалом атомных остовов в кристалле. Тем не менее, ни расчетов, например, на основе методов ТФП, подтверждающих этот факт, ни экспериментальных данных в пользу этого утверждения не приводится. Приведем далее экспериментальные результаты [55], в анализе и интерпретации которых участвовал автор диссертационного исследования, указывающие на критерии исключения слагаемых $\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\mathbf{g}}$ и $\frac{\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \Delta U$ из левой части уравнения (1.58).

В работе [55] проводились измерения спектров ЭСР и эффекта Холла на образцах Si природного изотопного состава, легированного висмутом (Bi) в процессе роста с концентрацией в диапазоне от $1.1 \cdot 10^{13}$ до $7.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Образцы были подготовлены в Институте роста кристаллов (гор. Берлин, Германия). Спектроскопия ЭСР в интервале T от 3.8 до 300 К проводилась на спектрометре BRUKER-EMXplus-10/12 с гелиевым криостатом и системой контроля температуры (3.8 – 300 К) ER 4112 HV. Измерения эффекта Холла выполнялись на установке HL5500PC high-performance Hall Effect Measurement System with HL5580PC Buffer Amplifier option and HL5550PC Liquid Nitrogen Cryostat. Кроме того, ряд электрических измерений проводился в интервале $T = 10 \div 100$ К с применением гелиевого криостата замкнутого цикла.

Основной целью работы [55] было исследование эффектов взаимодействия с тяжелыми донорами Bi в транспорте и спиновом резонансе электронов проводимости в Si. Предполагалось, что Bi как тяжелая примесь будет приводить к сильным спин-зависимым процессам рассеяния, которые могут быть обнаружены в эксперименте. При концентрации доноров менее 10^{14} см^{-3} спектры ЭСР трудно наблюдать из-за достижения предела чувствительности спектрометра. Для решения этой проблемы в образцы Si, легированного Bi (Si:Bi), методом диффузии дополнительно вводились легкие доноры лития (Li) до уровня $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Наши предыдущие исследования [56] СОВ, вносимого донором Li в Si, показали, что его величина на порядки меньше, чем для доноров V группы. Следовательно, его вклад в

спин-зависимые эффекты будет пренебрежимо мал в сравнении с СОВ Вi. Однако доноры Li при термической ионизации создают необходимую концентрацию носителей в образце, что позволяет наблюдать ЭСР и, соответственно, изучать эффекты, обусловленные присутствием в нем Вi.

На Рисунке 1 показаны зависимости ширины линии ЭСР от T для трех образцов Si природного изотопного состава с различной концентрацией Вi, подлегированных Li, а также, в сравнении с ними, в образце Si, допированного только Li. Из экспериментального исследования температурной зависимости сопротивления образцов [55] следует, что во всех образцах при $T < 50$ К электроны преимущественно локализованы на донорах, поэтому ЭСР в этом температурном диапазоне обусловлен поглощением радиочастотного излучения примесями. В образце без Вi и в двух образцах с низкой его концентрацией с ростом T от ~ 50 до ~ 100 К ширина линии уменьшается, что вызвано активацией электронных скачков между примесными центрами и сопутствующим ему двигательным сужением линии ЭСР [57]. При этом в образце с самой высокой концентрацией Вi ширина линии в этом температурном интервале возрастает. При $T > 100$ К в ЭСР доминирует уже вклад электронов проводимости, а линия ЭСР уширяется с увеличением T . Изучение именно этого участка и вызывало наибольший интерес в работе [55].

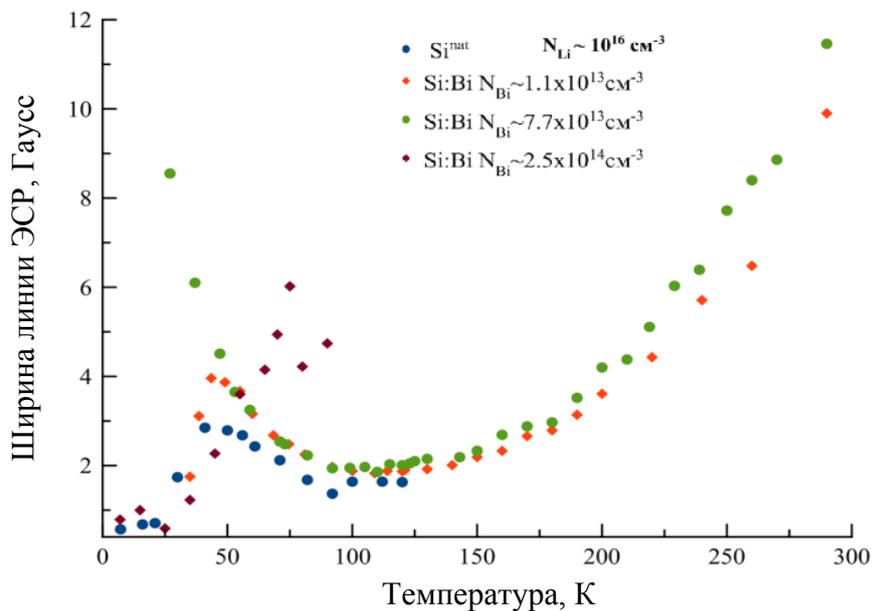


Рисунок 1 – зависимость ширины линии ЭСР от T для образцов Si природного изотопного состава с различной концентрацией Вi (N_{Bi}), указанной на рисунке, и концентрацией Li (N_{Li}) $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

Как видно из Рисунка 1, линия ЭСР для образца с концентрацией тяжелых доноров $\sim 2.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ с ростом T испытывает резкое уширение при $T \sim 100$ К, и далее ЭСР вообще не

наблюдается. При этом ширина линии ЭСР увеличивается и в температурном диапазоне 50 – 100 К, где для образцов с меньшей концентрацией Вi наблюдается сужение линии. Измерения спектров ЭСР, проводившиеся на образцах Si:Bi с концентрацией доноров, превосходящей $\sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, демонстрируют еще более драматическое уширение линии: фактически ЭСР не наблюдается не только при больших концентрациях тяжелых доноров, но и при средних и даже достаточно малых. Поскольку ширина линии ЭСР определяется скоростями электронной спиновой релаксации, такое критическое ее увеличение с ростом концентрации Вi связывается нами с активизацией канала спиновой релаксации, обусловленного рассеянием электронов на донорах Вi.

Основным механизмом спиновой релаксации электронов проводимости в Si ввиду центросимметричности его кристаллической структуры является механизм Эллиотта [58] и Яфета [59], где релаксация спина происходит в результате рассеяния на дефектах кристаллической структуры с переворотом спина. Согласно Эллиотту [58] вероятность переворота электронного спина в единицу времени τ_s^{-1} при рассеянии на примеси может быть оценена как $b_{SO} \cdot \tau_p^{-1}$, где τ_p^{-1} – вероятность изменения импульса электрона в единицу времени, а b_{SO} – безразмерный параметр, определяемый величиной СОВ в кристалле, и в современной трактовке интерпретируемый как параметр *межзонного спинового смешивания* [60]. Величина b_{SO} определяется только электронной структурой материала, поэтому процессы спиновой релаксации Эллиотта контролируются временем упругого рассеяния электронов. Величина b_{SO} для состояний вблизи дна зоны проводимости Si по данным [60] составляет $\sim 2 \cdot 10^{-6}$.

В [55] нами по результатам исследования эффекта Холла для тех же образцов были вычислены характерные времена τ_p упругого рассеяния, показанные на Рисунке 2. Из него можно видеть, что изменение концентрации Вi мало сказывается на скоростях релаксации импульса, особенно при $T > 120 \text{ К}$. Этот результат фактически означает, что существенное возрастание скорости спиновой релаксации в образцах Si:Bi при увеличении концентрации примеси не объясняется активацией процессов спиновой релаксации Эллиотта.

По нашему мнению, драматическое уширение линии ЭСР в Si:Bi связано с активацией процессов Яфета [59], обусловленных наличием в легированном кристалле остаточного примесного СОВ. Как хорошо известно, в атомах тяжелых элементов СОВ велико, поэтому существенное локальное СОВ должно сохраняться и при внедрении тяжелых примесей в полупроводник. В результате именно такое сильное СОВ атомного остова Вi индуцирует интенсивные процессы переворота спина электронов в Si, в связи с чем даже при небольших концентрациях примеси скорости спиновой релаксации электронов проводимости оказываются

велики. С точки зрения расчета в рамках приближения огибающей функции примесное СОВ является внешним. Таким образом, при внедрении в Si тяжелых доноров Vi доминирует именно внешнее СОВ $\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}[\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\mathbf{c}}$, и его исключение (на ряду, конечно, с дарвиновским членом

$\frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta U$) из уравнения (1.58) некорректно.

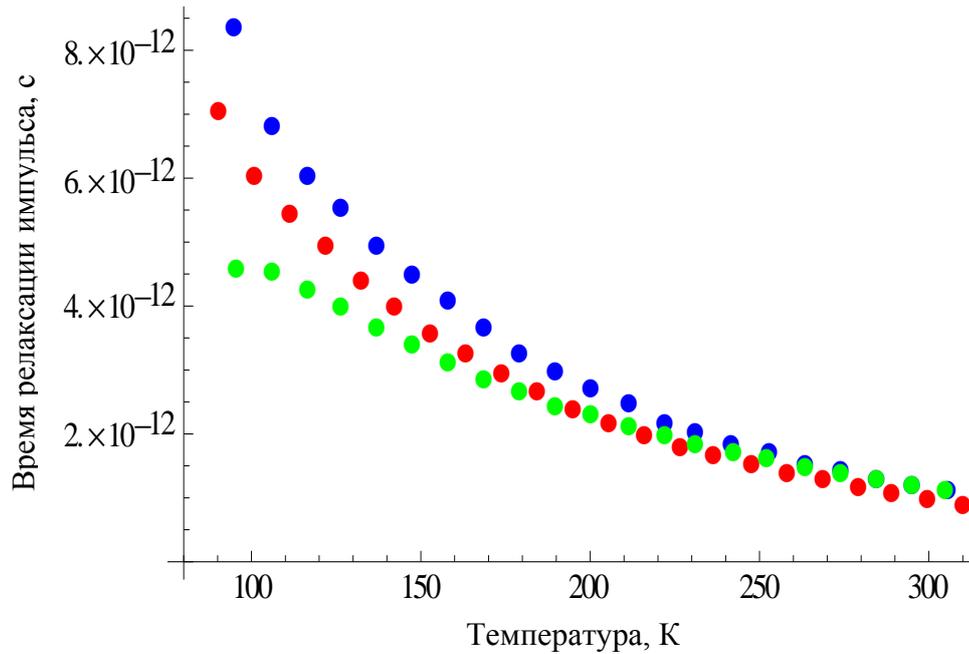


Рисунок 2 – зависимость характерного времени релаксации импульса τ_p от T для образцов Si природного изотопного состава с концентрацией Li $\sim 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и различной концентрацией Vi: $1.2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (•), $7.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ (•), $2.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (•).

Существует ряд фактов, косвенно подтверждающих выполненный анализ экспериментальных данных по ЭСР системы Si:Vi. Во-первых, столь высоких скоростей спиновой релаксации электронов проводимости в Si не наблюдается при таких достаточно низких ($\sim 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$) концентрациях других, более легких, доноров V группы: фосфора (P), мышьяка (As) и сурьмы (Sb) (см. [61, 62] и литературу, цитируемую в этих источниках), характеризующихся меньшим остаточным СОВ. Во-вторых, триплетное состояние электрона, локализованного на мелком доноре Vi в Si, существенно в сравнении с другими донорами V группы расщеплено короткодействующим СОВ [63], которое и фигурирует в уравнении для определения огибающей и, по нашему мнению, определяет высокие скорости электронной спиновой релаксации в Si:Vi. В-третьих, наши исследования [56] примесного СОВ одного из

самых легких возможных доноров в Si – Li – показывают, что его величина пренебрежимо мала для учета в уравнении (1.58).

Таким образом, критерием исключения из уравнения (1.58) релятивистских поправок к внешнему потенциалу является отсутствие сильного остаточного атомного СОВ, другими словами, в системе не должно быть тяжелых примесных атомов, порождающих такое СОВ. Этот результат в принципе согласуется с положением, выдвинутым в книге [54]. В диссертационном исследовании системы с тяжелыми примесями далее рассматриваться не будут. Соответственно, уравнение для определения огибающей в импульсном представлении примет вид:

$$\sum_{n j m_j} H_{glm_l n j m_j}^{(0)}(\mathbf{q}) F_{n j m_j}(\mathbf{q}) + \sum_{\substack{n j m_j \\ \mathbf{k} \in B.z.}} \bar{U}_{glm_l n j m_j}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) F_{n j m_j}(\mathbf{k}) = E F_{glm_l}(\mathbf{q}), \quad (1.61)$$

где $H_{glm_l n j m_j}^{(0)}(\mathbf{q})$ – $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониан при учете релятивистских поправок, а

$$\bar{U}_{glm_l n j m_j}(\mathbf{q} - \mathbf{k}) = \int_W d\mathbf{r} \exp(-i(\mathbf{q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}) (\psi_{g 0 l m_l}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n 0 j m_j}(\mathbf{r})). \quad (1.62)$$

Уравнение (1.61) является релятивистским обобщением (1.16) с точностью до членов $\propto 1/c^2$. Все подходы, развитые для решения (1.16), включая переход к координатному представлению и каноническое преобразование, применимы и к (1.61). Кроме того, (1.61) допускает естественное обобщение для многодолинного полупроводника.

1.6. Заключительные замечания по Главе 1

В диссертационной работе для исследования квантовых состояний в полупроводниковых системах решаться будут только уравнения в реальном пространстве типа (1.44) на собственные функции и собственные значения эквивалентного гамильтониана (1.45), записанного в одно- или многозонном приближении. В связи с этим для упрощения дальнейшего изложения набор функций $f_{l\eta}(\mathbf{r})$, являющихся компонентами собственного вектора матричного оператора типа (1.45), отвечающего собственному значению E , будем понимать как *многокомпонентную огибающую функцию*, отвечающую квантовому состоянию с той же энергией E . В этом случае волновая функция может быть записана как

$$\Phi(\mathbf{r}) \approx \sum_{\eta} f_{l\eta}(\mathbf{r}) (\sqrt{W} \psi_{l 0 \eta}(\mathbf{r})). \quad (1.63)$$

Ввиду того, что уравнение (1.44) есть дифференциальное уравнение в частных производных, оно должно быть дополнено системой граничных условий. Чтобы сформулировать граничные условия, необходимо знать, производные какого порядка содержит

эквивалентный оператор Гамильтона (1.45). Если в нем есть дифференциальные операторы второго порядка, то компоненты огибающей необходимо положить непрерывными, а условие сшивки пространственных производных огибающей нужно получать посредством интегрирования уравнения (1.45) вблизи интерфейса. Если же (1.45) содержит дифференциальные операторы только первого порядка, то условие сшивки должно быть сформулировано для компонент огибающей. Условия сшивки в обоих случаях определяются не только структурой $k\cdot p$ -гамильтониана (1.42), но и эффективной потенциальной энергией $\bar{U}_{l\eta l\mu}(\mathbf{r})$.

Остановимся теперь подробнее на переходе в эффективной потенциальной энергии от (1.36) к (1.38). Он осуществляется посредством замены

$$\psi_{l_0\eta}^*(\mathbf{r})\psi_{m_0\mu}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{W} \delta_{lm} \delta_{\eta\mu}, \quad (1.64)$$

оценка точности которой, строго говоря, требует информации о блоховских функциях идеального кристалла. Приближение (1.64) является необходимым, скорее, по самому смыслу метода огибающей функции: информация о свойствах кристалла должна остаться лишь в наборе эмпирических параметров, входящих в $k\cdot p$ -гамильтониан, но не в потенциальной энергии. Тем не менее, при отыскании энергий и огибающих функций локализованных состояний оно имеет достаточно высокую точность, обусловленную быстрым затуханием огибающих в областях, где эффективная потенциальная энергия может иметь отклонения от истинной. Другими словами, там, где приближение (1.64) может быть недостаточно обосновано, огибающая мала, и эффективную потенциальную энергию все равно можно заменить на истинную.

В силу условия (1.30) огибающая функция нормирована по объему кристалла, ввиду чего она пропорциональна $W^{-1/2}$. В диссертации методом огибающей функции изучаются только локализованные состояния, для которых этот множитель может быть естественным образом исключен. Огибающая, отвечающая локализованному состоянию, затухает вблизи границ кристалла фактически до нуля, в связи с чем интегрирование по объему кристалла можно распространить до бесконечности и получить следующее условие нормировки огибающей функции:

$$\sum_{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} |f_{l\eta}|^2(\mathbf{r}) = 1. \quad (1.65)$$

При обсуждении и анализе приближения огибающей функции нами умышленно была опущена важная задача о блоховском электроде, помещенном во внешнее магнитное поле. Если магнитное поле является сильным, квантующим, то в полупроводнике необходимо

рассчитывать уровни Ландау [46]. Решение такого класса задач выходит за пределы данного диссертационного исследования.

Если же магнитное поле слабое, задача сводится к расчету эффективного фактора Ландэ, описывающего линейный отклик зонного электрона на слабое магнитное поле. В рамках общей теории расчета одноэлектронного g -фактора в полупроводнике [41] эффективный гамильтониан не вводится, а фактор Ландэ определяется как еще один зонный параметр, аналогичный, например, эффективной массе носителей. Таким образом, эффективный g -фактор в полупроводнике определяется фактически в рамках традиционного $k\cdot p$ -метода, в связи с чем мы и избегаем разбора в Главе 1 общей теории этого вопроса.

1.7. Выводы по Главе 1

1. Задача нахождения спектра электрона в неидеальном кристалле может быть сведена к нахождению собственных функций и собственных значений эффективного матричного гамильтониана, в котором оператор кинетической энергии получен посредством замены в $k\cdot p$ -гамильтониане идеального кристалла квазиволнового вектора на оператор $-i\nabla$, а в качестве эффективной потенциальной энергии может использоваться истинная.

2. Приближение огибающей функции элементарно обобщается на случай многодолинного полупроводника, если междолинное смешивание, индуцированное внешним полем, пренебрежимо мало. При этом спектр квантовых состояний обладает долинным вырождением.

3. Если в системе нет тяжелых примесей, обладающих собственным (остаточным атомным) сильным СОВ, СОВ и другие релятивистские поправки того же порядка малости в рамках приближения огибающей учитываются только в операторе эффективной кинетической энергии.

4. Граничные условия в методе огибающей функции определяются порядком дифференциального оператора эффективной кинетической энергии и структурой внешнего потенциала и могут быть получены посредством интегрирования уравнения для огибающей вблизи интерфейса.

Глава 2. Спиновое смешивание в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов

Одним из преимуществ приближения огибающей функции в сравнении с другими расчетными методами, применяемыми в теории полупроводников, является относительно простая возможность принять во внимание СОВ в наноструктурах. В этой главе метод огибающей будет использован для исследования квантовых состояний в кремниевых НК при учете СОВ. Будет вычислен параметр спинового смешивания b_{so} в зоне проводимости кристаллитов Si, имеющий важное прикладное значение с точки зрения проектирования приборов, работающих на спиновых эффектах.

2.1. Спиновые свойства кремниевых нанокристаллов: вводные замечания

Несмотря на то, что электронные [64–67], оптические [66, 68, 69] и электрические [69–71] свойства кремниевых кристаллитов изучаются уже достаточно давно, в ходе теоретических расчетов и анализа экспериментальных результатов эффектами кристаллического СОВ ввиду их малости, как правило, пренебрегают. Если СОВ в НК Si ранее учитывалось при расчете состояний валентной зоны (дырочных уровней) [72–74], то для зоны проводимости оно просто не принималось во внимание. Вблизи потолка валентной зоны в отсутствие СОВ электронные блоховские функции составляют орбитальный триплет, преобразующийся по неприводимому представлению Γ'_{25} группы волнового вектора точки Γ структуры алмаза. Учет СОВ приводит к перемешиванию координатных частей блоховских функций и частичному снятию трехкратного орбитального вырождения посредством формирования зоны легких и тяжелых дырок и отщепленной зоны, разделенных спин-орбитальной щелью Δ_0 , равной в объемном Si по экспериментальным данным [75] 42.62 мэВ.

В то же время, вблизи дна зоны проводимости электронные волновые функции не обладают орбитальным моментом (в бесспиновом пределе в каждом из 6 минимумов зоны проводимости периодические части блоховских функций преобразуются по единичному неприводимому представлению Δ_1 точечной группы C_{4v}). По этой причине само по себе СОВ не приводит к снятию двукратного вырождения по спину, а ввиду своей малости практически не влияет на значения энергий электронов. Однако СОВ приводит к межзонному смешиванию состояний с противоположным направлением спина, так что электронные волновые функции перестают быть «чистыми» по спину [58]. Такое спиновое смешивание в объемном Si

определяет скорости спиновой релаксации электронов проводимости по механизму Эллиотта [58] и Яфета [59]. Поскольку, вследствие эффекта размерного квантования, оно может заметно видоизменяться в НК в сравнении с объемным Si, а спиновая релаксация все еще будет преимущественно индуцироваться электрон-фононным взаимодействием, то для дальнейшего анализа динамических и релаксационных спиновых явлений в кремниевых кристаллитах необходимы расчеты спиновой структуры зоны проводимости, в особенности основного состояния, которые к настоящему времени еще не проводились. Глава 2 посвящена решению этой задачи.

2.2. Эквивалентный гамильтониан в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов при учете спин-орбитального взаимодействия

Рассмотрим сферическую кремниевую КТ радиуса R в матрице широкозонного диэлектрика, такого как диоксид кремния (SiO_2) или оксид алюминия (Al_2O_3). Диэлектрическое окружение НК полагаем аморфным, чтобы можно было пренебречь механическими напряжениями на границе кристаллита. Также для простоты расчетов пренебрежем эффектами кулоновского взаимодействия носителей с полями собственных изображений.

Истинная потенциальная энергия $U(\mathbf{r})$ для носителей (электронов и дырок) в НК определяется, строго говоря, разницей между неупорядоченным потенциалом аморфного диэлектрика и кристаллическим потенциалом полупроводника, которая в первую очередь обуславливает возникновение разрывов энергетических зон (проводимости ΔE_c и валентной ΔE_v) на границе раздела Si и диэлектрика. В силу того, что характерные значения разрывов обеих зон на интерфейсе «Si / широкозонный диэлектрик» являются большими величинами в сравнении с типичными энергиями размерного квантования (например, в случае SiO_2 они составляют 4.5 и 3.3 эВ для валентной зоны и зоны проводимости, соответственно [76]), квантовые состояния являются сильно локализованными внутри КТ.

В результате, во-первых, истинную потенциальную энергию для электрона (далее речь пойдет только о зоне проводимости) можно считать сферически симметричной и определяемой лишь величиной разрыва зон проводимости Si и диэлектрика:

$$U_{CB}(\mathbf{r}) \equiv U_{CB}(r) = \Delta E_c \mathcal{G}(r - R), \quad (2.1)$$

где r – расстояние до центра НК, а $\mathcal{G}(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда своего аргумента. Во-вторых, можно пренебречь междолинным смешиванием в зоне проводимости кристаллита, индуцированным резкой гетерограницей в реальном пространстве в силу малости волновой функции в области границы. В-третьих, сильная локализация внутри КТ удовлетворяет

условиям замены (1.64), и эффективная потенциальная энергия будет фактически совпадать с истинной (2.1). В этом случае для расчета квантовых состояний можно записать набор не связанных друг с другом уравнений вида (1.44) с потенциальной энергией (2.1) и $k\cdot p$ -гамильтонианами, отвечающими различным энергетическим минимумам, а квантовые состояния будут 6 -кратно вырождены по числу долин.

Наконец, ввиду сильной локализации в КТ, при расчете электронных состояний будем пользоваться моделью бесконечно глубокой сферической потенциальной ямы. Этот подход, несмотря на известное завышение значений энергии носителей в НК [24], позволяет правильно описать иерархию и симметрию квантовых состояний. В таком случае в эквивалентном гамильтониане сохраняется лишь слагаемое, отвечающее эффективной кинетической энергии, а локализация, обусловленная внешним полем, описывается посредством обращения в нуль огибающей на поверхности НК.

Следуя работе [77], будем описывать электронные состояния в НК в блоховском базисе трех двукратно вырожденных (без учета спина) точек X зоны проводимости (блоховские функции в каждой из них преобразуются по неприводимому представлению X_1 группы волнового вектора). С учетом всех сделанных приближений, в бесспиновом пределе в окрестности X -точки зоны Бриллюэна, лежащей в направлении a , эффективный гамильтониан электрона в базисе $\{X_{1a}^{(1)}(\uparrow, \downarrow), X_{1a}^{(2)}(\uparrow, \downarrow)\}$, где обозначения « \uparrow » и « \downarrow » отвечают паре базисных блоховских состояний с противоположной проекцией спина, может быть записан в виде [78]:

$$\hat{H}_{\uparrow\uparrow}^a(\mathbf{r}) = \hat{H}_{\downarrow\downarrow}^a(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}_a^2}{2m_l} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{p}_a^2}{2m_t} & \left(\frac{1}{m_t} - \frac{1}{m_0}\right)\hat{p}_b\hat{p}_c + i\frac{p_0}{m_l}\hat{p}_a \\ \left(\frac{1}{m_t} - \frac{1}{m_0}\right)\hat{p}_b\hat{p}_c - i\frac{p_0}{m_l}\hat{p}_a & \frac{\hat{p}_a^2}{2m_l} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{p}_a^2}{2m_t} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

где m_l и m_t имеют смысл продольной и поперечной эффективных масс электрона в полупроводнике с эллипсоидальным законом дисперсии вблизи дна зоны проводимости, в объемном Si их значения согласно [79] составляют $m_l \approx 0.92m_0$ и $m_t \approx 0.19m_0$,

$$p_0 = \hbar k_0 \approx 0.146 \cdot 2\pi\hbar/a_0 \quad (2.3)$$

($a_0 \approx 0.54307$ нм – параметр решетки объемного Si) [80] является расстоянием в импульсном пространстве между одной из точек X и ближайшим к ней минимумом зоны проводимости, а нижние индексы b и c отвечают паре взаимно перпендикулярных направлений в импульсном пространстве, ортогональных к направлению a . Под b и c удобно понимать пару направлений Δ , перпендикулярных к тому, вдоль которого расположена рассматриваемая точка X . Другими словами, если $a = x, y, z$, то $b = y, z, x$ и $c = z, x, y$. Ниже употребление индексов b и c в совокупности с индексом a имеет тот же, означенный здесь, смысл.

Электронная волновая функция может быть в общем случае представлена в виде линейной комбинации произведений огибающих и блоховских функций, отвечающих всем трем неэквивалентным (не связанным друг с другом векторами обратной решетки) X -точкам зоны проводимости, с произвольными коэффициентами:

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{a=x,y,z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} C_{a\sigma} f_{a\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{a\sigma}(\mathbf{r}) + C'_{a\sigma} f'_{a\sigma}(\mathbf{r}) \psi'_{a\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.4)$$

где $\psi_{a\sigma}(\mathbf{r})$ и $\psi'_{a\sigma}(\mathbf{r})$ – блоховские функции бесконечного кристалла, отвечающие точке X зоны проводимости, лежащей вдоль направления a зоны Бриллюэна, $f_{a\sigma}(\mathbf{r})$ и $f'_{a\sigma}(\mathbf{r})$ – соответствующие им компоненты огибающей, определяемые в ходе решения уравнения на собственные функции и собственные значения гамильтониана (2.2), а коэффициенты $C_{a\sigma}$ и $C'_{a\sigma}$ должны удовлетворять условию нормировки волновой функции (2.4) на единицу.

Как было указано выше, при учете СОВ

$$\hat{H}_{SO} \propto \hat{l}_x \hat{\sigma}_x + \hat{l}_y \hat{\sigma}_y + \hat{l}_z \hat{\sigma}_z, \quad (2.5)$$

где \hat{l}_a обозначает a -ую компоненту орбитального момента, блоховские функции в зоне проводимости Si перестают описывать состояния с определенной проекцией спина [58]. В силу малости СОВ в Si по сравнению со скалярным кристаллическим потенциалом, учтем его по теории возмущений. Для удобства выберем в качестве оси квантования спина кристаллографическое направление $[0\ 0\ 1]$, а в качестве спинового базиса – собственные векторы матрицы $\hat{\sigma}_z$. В таком случае находим, что операторы $\hat{l}_x \hat{\sigma}_x$ и $\hat{l}_y \hat{\sigma}_y$ могут подмешивать к «чистым» по спину блоховским функциям зоны проводимости волновые функции других зон с противоположным направлением спина, в частности, ближайшей (по энергии) валентной зоны. Фактически, возникает межзонная спин-орбитальная связь, которая приводит к изменению $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониана и необходимости учета дополнительных связанных с ней слагаемых при расчете электронного спектра.

Периодические части блоховских функций валентной зоны в Si, подмешиваемых посредством СОВ к блоховским функциям зоны проводимости, преобразуются по двумерному неприводимому представлению Δ_5 точечной группы C_{4v} – как два единичных вектора, ортогональных оси долины (среди элементов симметрии группы C_{4v} это есть ось 4-ого порядка). Так, если рассматривается направление $[0\ 0\ 1]$ зоны Бриллюэна (z -долина), они преобразуются подобно ортам \mathbf{e}_x и \mathbf{e}_y декартовой системы координат. В этом случае компоненты орбитального момента \hat{l}_x и \hat{l}_y подмешивают к волновым функциям зоны проводимости обе функции валентной зоны – y - и x -типа соответственно. Несколько иная ситуация имеет место в x - и y -долинах: с противоположными проекциями спина смешиваются

только функция Δ_1 зоны проводимости и функция Δ_5 валентной зоны, обладающая симметрией z -типа (преобразуется как орт \mathbf{e}_z декартовой системы координат). Таким образом, вблизи дна зоны проводимости объемного Si спиновое смешивание, обусловленное СОВ, как говорят, обладает долиной анизотропией [60]: оно отличается в продольном и поперечном по отношению к оси квантования спина направлениях.

Однако введенная долиная анизотропия спинового смешивания является в определенной степени искусственной. Во-первых, количественно она обусловлена выбором оси квантования спина и спинового базиса. Например, в собственном базисе матрицы $\hat{\sigma}_x$ за перемешивание волновых функций с противоположными проекциями спина отвечают операторы $\hat{l}_y\hat{\sigma}_y$ и $\hat{l}_z\hat{\sigma}_z$, что приводит к выделению долины уже в направлении $[1\ 0\ 0]$. Более того, если в качестве оси квантования спина выбрать кристаллографическое направление $[1\ 1\ 1]$, смешивания во всех направлениях (по абсолютной величине) будут одинаковыми. Во-вторых, основное состояние в зоне проводимости объемного Si является 6-кратно вырожденным по долинам, в результате чего экспериментально наблюдаемое спиновое смешивание будет усреднено по всем долинам.

Спин-орбитальная связь зоны проводимости и валентной зоны непосредственно в окрестности X -точки зоны Бриллюэна была впервые рассмотрена в работе [81]. Ее авторами в спиновом базисе матрицы $\hat{\sigma}_z$ получен $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан размерности 8×8 , точно учитывающий взаимодействие блоховских состояний X_1 зоны проводимости и нижележащих состояний X_4 валентной зоны. Ими также установлено, что блоки гамильтониана, обусловленные межзонной спин-орбитальной связью, отличаются в продольной (z -) и поперечных (x - и y -) по отношению к оси квантования спина долинах, что является проявлением анизотропии спинового смешивания. Стоит также отметить, что СОВ не снимает двукратное орбитальное вырождение в точке X структуры алмаза [60], другими словами, при учете спина и СОВ квантовые состояния как в точке X_1 , так и в X_4 вырождены четырехкратно.

С использованием методики, предложенной в [81] для учета межзонного смешивания в точке X , запишем в блоховском базисе А. А. Копылова [78] (включая спин и СОВ) недиагональные неэрмитовы блоки размерности 4×4 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана зон $X_1 \oplus X_4$: в z -долине (продольной по отношению к оси квантования спина)

$$H_{cv}^z(\mathbf{k}) = (H_{vc}^z)^+(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} iP_{cv}k_y & iP_{cv}k_x & \Delta_X & -i\Delta_X \\ -iP_{cv}k_x & -iP_{cv}k_y & -i\Delta_X & \Delta_X \\ -\Delta_X & -i\Delta_X & iP_{cv}k_y & iP_{cv}k_x \\ -i\Delta_X & -\Delta_X & -iP_{cv}k_x & -iP_{cv}k_y \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

и в x -долине (поперечной)

$$H_{cv}^x(\mathbf{k}) = (H_{vc}^x(\mathbf{k}))^\dagger(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} iP_{cv}k_z & -i\Delta_x + iP_{cv}k_y & i\Delta_x & 0 \\ -i\Delta_x - iP_{cv}k_y & -iP_{cv}k_z & 0 & i\Delta_x \\ i\Delta_x & 0 & iP_{cv}k_z & i\Delta_x + iP_{cv}k_y \\ 0 & i\Delta_x & i\Delta_x - iP_{cv}k_y & -iP_{cv}k_z \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

где положительные постоянные $\Delta_x \approx 3.5$ мэВ [81] и $P_{cv} \approx 0.9$ эВ·нм [79] являются модулями матричных элементов операторов \hat{H}_{SO} и $\hbar\hat{\mathbf{p}}/m_0$ относительно блоховских состояний X_1 зоны проводимости и X_4 валентной зоны. Недиagonalный блок $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана в y -долине может быть получен из (2.7) элементарной перестановкой координат x и y . В (2.6) и (2.7) в сравнении с аналогичными выражениями, предложенными в [81], ввиду малости опущены слагаемые, содержащие матричные элементы оператора релятивистских поправок к импульсу (1.60). Заметим также, что в пренебрежении СОВ матрицы (2.6) и (2.7) эквивалентны с точностью до циклической перестановки декартовых координат. Отличия между ними, определяемые матричными элементами оператора \hat{H}_{SO} , связаны с проявлением анизотропии спинового смешивания в собственном базисе $\hat{\sigma}_z$.

Для описания вкладов в эквивалентный гамильтониан в зоне проводимости, обусловленных межзонной спин-орбитальной связью, учтем (2.6) и (2.7) по теории возмущений, или, что то же самое, посредством канонического преобразования. В результате, поправка к $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониану в блоховском базисе X_1 зоны проводимости в a -долине может быть записана как

$$\delta H_{CB}^a(\mathbf{k}) = \frac{1}{E_{g,x}} H_{cv}^a(\mathbf{k}) H_{vc}^a(\mathbf{k}), \quad (2.8)$$

где $E_{g,x} \approx 4.3$ эВ [82] – прямая энергетическая щель между зонами проводимости и валентной в X -точке. Сохраняя в (2.8) только недиагональные по спину матричные элементы, описывающие межзонное спиновое смешивание, эквивалентный гамильтониан 4×4 вблизи точки X_1 зоны проводимости при учете межзонной спин-орбитальной связи можно записать (для долины в направлении a) в базисе $\{X_{1a}^{(1)\uparrow}, X_{1a}^{(2)\uparrow}, X_{1a}^{(1)\downarrow}, X_{1a}^{(2)\downarrow}\}$ в блочно-диагональном виде как

$$\hat{H}_{CB}^a(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \hat{H}_{\uparrow\uparrow}^a & \hat{H}_{\uparrow\downarrow}^a \\ \hat{H}_{\downarrow\uparrow}^a & \hat{H}_{\downarrow\downarrow}^a \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

где недиагональные блоки, обусловленные спиновым смешиванием, имеют вид: в z -долине

$$\hat{H}_{\uparrow\downarrow}^z(\mathbf{r}) = (\hat{H}_{\downarrow\uparrow}^z)^\dagger(\mathbf{r}) = \mathcal{Q} \begin{pmatrix} -\hat{p}_+ & 0 \\ 0 & \hat{p}_+ \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

и в x, y -долинах

$$\hat{H}_{\uparrow\downarrow}^{x,y}(\mathbf{r}) = (\hat{H}_{\downarrow\uparrow}^{x,y})^\dagger(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} \hat{p}_z & 0 \\ 0 & -\hat{p}_z \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

в них традиционно введена пара эрмитово сопряженных операторов $\hat{p}_x \pm i\hat{p}_y \equiv \hat{p}_\pm$, а положительная величина

$$Q = 2\Delta_x P_{cv} / \hbar E_{g,x} \quad (2.12)$$

имеет смысл параметра межзонной спин-орбитальной связи. Отличие между (2.10) и (2.11) обусловлено выделением z -долины из-за выбора спинового базиса $\hat{\sigma}_z$. Эффективный гамильтониан (2.9) представляет собой естественное обобщение исходного бесспинового гамильтониана (2.2) на случай наличия спин-орбитальной связи валентной зоны и зоны проводимости.

Недиагональные по проекции спина блоки (2.10) и (2.11) эффективного гамильтониана являются линейными по импульсу. Кроме того, диагональные блоки матрицы (2.9) содержат линейные по оператору $\hat{\mathbf{p}}$ вклады вида $ip_0 \hat{p}_a / m_l$ ($a = x, y, z$). Сопоставим их друг с другом по величине посредством сравнения положительных параметров Q и p_0 / m_l . Как известно, значение матричного элемента P_{cv} определяет поперечную массу m_l электронов в Si [79], так что можно записать:

$$\frac{1}{m_l} \approx \frac{1}{m_0} + \frac{2P_{cv}^2}{\hbar^2 E_{g,x}}, \quad (2.13)$$

откуда, сопоставляя с (2.12), следует

$$Q \approx \left(\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{\Delta_x \hbar}{P_{cv}}. \quad (2.14)$$

Учтем теперь, что

$$\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_0} \approx \frac{4}{m_0}, \quad (2.15)$$

тогда

$$Q \approx \frac{4\Delta_x}{P_{cv}} \cdot \frac{\hbar}{m_0}. \quad (2.16)$$

В то же время, с помощью (2.3) получим

$$\frac{p_0}{m_l} \approx \frac{1}{a_0} \cdot \frac{\hbar}{m_0} \quad (2.17)$$

Используя приведенные выше численные значения для Δ_x и P_{cv} , получаем, что $4\Delta_x / P_{cv} \approx 1.5 \cdot 10^{-2} \text{ нм}^{-1}$, в то время как $a_0^{-1} \approx 1.8 \text{ нм}^{-1}$, откуда заключаем, что вклад от

межзонной спин-орбитальной связи в (2.9) по абсолютной величине на 2 порядка меньше, чем недиагональные линейные члены в исходном гамильтониане (2.2), что является следствием малости СОВ в Si по сравнению со скалярным периодическим потенциалом.

Определение электронного спектра в зоне проводимости кристаллита сводится теперь к отысканию собственных значений и собственных функций гамильтониана (2.9) в пространстве огибающих с учетом нулевых граничных условий ввиду использования приближения бесконечно глубокой потенциальной ямы для носителей. Решение этой задачи в бесспиновом пределе методом теории возмущений [83] подробно изложено в [77]. Следуя этой работе, в качестве нулевого приближения вблизи каждой точки X зоны проводимости примем гамильтониан

$$\hat{H}_{0CB}^a(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_{aver}} \hat{L}_0, \quad (2.18)$$

$a = x, y, z$, полученный усреднением (2.9) по направлениям в обратном пространстве, где

$$\frac{1}{m_{aver}} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) \quad (2.19)$$

– обратная усредненная по направлениям в \mathbf{k} -пространстве эффективная масса электрона, а \hat{L}_0 – квадратная единичная матрица размерности неприводимого представления, по которому преобразуются блоховские функции (с учетом спина и СОВ) в точке X_1 зоны проводимости (4×4). Разность между \hat{H}_{CB}^a и \hat{H}_{0CB}^a , $a = x, y, z$, будем учитывать как возмущение, выполняя разложение по базисным функциям гамильтониана нулевого приближения, которые представляют собой собственные функции электрона в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме (орбитали $1s$, $1p$, $1d$, $2s$, $1f$, $2p$ и т.д.) [83]. Возникающие в результате расчетов отклонения от спектра частицы с квадратичным изотропным спектром в сферической яме будем трактовать с помощью сдвигов по энергии, расщепления уровней и смешивания состояний, обусловленных поправками к гамильтониану (2.18). Ниже этот подход применяется для исследования тонкой структуры основного состояния в зоне проводимости кремниевых кристаллитов.

2.3. Параметр спинового смешивания в кремниевых нанокристаллах

При исследовании транспортных и релаксационных процессов в массиве кремниевых НК особую роль играет знание основного состояния электронов и дырок в уединенном

кристаллите [71]. В этом параграфе сосредоточимся главным образом на изучении основного электронного состояния в КТ в присутствии СОВ.

Как показано в [77], в бесспиновом пределе энергия основного состояния в зоне проводимости кремниевых КТ является 6-кратно вырожденной, поскольку каждый из трех гамильтонианов $\hat{H}_{\uparrow\uparrow}^a$, имеет одно и то же двукратно вырожденное собственное значение в основном состоянии, волновые функции которого получаются в результате гибридизации огибающих функций $1s$ - и $1p_a$ -типа. Принимая во внимание еще и спин, кратность вырождения основного состояния увеличивается до 12 и является, по сути, такой же, как в объемном Si.

При учете СОВ электронный гамильтониан в окрестности каждой X -точки перестает быть диагональным по спину, что модифицирует квантовые состояния, включая основное. Как видно из (2.10) и (2.11), наличие таких недиагональных блоков в \hat{H}_{CB}^a , приводит к подмешиванию к огибающим функциям $1s$ -типа помимо продольных $1p_a$ -функций еще и поперечных $1p_{b,c}$ -функций. Детальный анализ показывает, что в X -точке, находящейся на направлении $[1\ 0\ 0]$, к $1s$ - $1p_x$ -гибридизованной огибающей волновой функции основного состояния с определенной проекцией спина (будем считать для определенности, что со спином «вверх») подмешивается $1p_z$ -функция с противоположным направлением спина («вниз»). Аналогичная ситуация возникает и в направлении $[0\ 1\ 0]$, где $1s$ - $1p_y$ -гибридизованная функция со спином «вверх» также модифицируется огибающей $1p_z$ -типа, характеризующейся спином «вниз». В то же время в направлении $[0\ 0\ 1]$ (вдоль оси квантования спина) обе поперечные функции $1p$ -типа – $1p_x$ и $1p_y$ – подмешиваются к $1s$ - $1p_z$ -функции с противоположной проекцией спина. Возникшая анизотропия в смешивании огибающих функций приводит к некоторой «выделенности» волновых функций в базисе X -точки на направлении $[0\ 0\ 1]$: подмешивание состояний с противоположным спином оказывается в 2 раза «эффективнее», чем на других направлениях с вращательной симметрией 4-го порядка в зоне Бриллюэна.

Наши расчеты показывают, что с учетом СОВ энергия основного состояния в зоне проводимости несколько уменьшается по сравнению с ее значением, рассчитанным в бесспиновом пределе. Это свидетельствует фактически о том, что в условиях полного трехмерного ограничения движения носителей заряда СОВ обладает свойством эффективного притяжения. В принципе, такое поведение спектра КТ отвечает общим свойствам систем с СОВ [54]. Тем не менее, наши оценки показывают, что величина этого сдвига составляет $\sim 10^{-5}$ эВ в НК с R от 1 до 3 нм вследствие малости межзонной спин-орбитальной связи. Очевидно, такой

сдвиг может не приниматься во внимание в сравнении с характерными энергиями размерного квантования электронов.

Подчеркнем, что, несмотря на эффекты спинового смешивания, СОВ само по себе не приводит к снятию вырождения в зоне проводимости, так что нижний энергетический уровень в спектре, отвечающий каждому гамильтониану \hat{H}_{CB}^a , остается 4-кратно вырожденным. Более того, «выделенность» состояний в направлении квантования спина не приводит к снятию энергетического вырождения между X -точками, расположенными на различных направлениях. Дело в том, в гамильтониане (2.11) нами ввиду малости опущены диагональные по спину слагаемые, порожденные СОВ:

$$\delta\hat{H}_{\uparrow\uparrow}^{x,y}(\mathbf{r}) = -\delta\hat{H}_{\downarrow\downarrow}^{x,y}(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} -\hat{p}_{y,x} & 0 \\ 0 & \hat{p}_{y,x} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

которые не меняют спиновое состояние, однако смешивают $1s-1p_{x,y}$ -гибридизованные функции основного состояния с возбужденными $1p_{y,x}$ -орбиталями с одинаковыми проекциями спина. В результате, основное электронное состояние в НК остается 12-кратно вырожденным и при учете СОВ.

Теперь интерпретируем изменение структуры основного состояния в КТ, используя качественные соображения. СОВ, как известно, может смешивать состояния с отличными на единицу орбитальными моментами (см., например, [59]). При этом полный орбитальный момент, отвечающий квантовому состоянию, будет складываться из орбитального момента блоховской функции и орбитального момента огибающей [84]. В зоне проводимости кремниевых кристаллитов орбитальный момент, отвечающий блоховским функциям, можно полагать равным нулю, поэтому \hat{H}_{SO} приводит к смешиванию волновых функций, орбитальные моменты огибающих которых отличны на единицу, а операторы $\hat{l}_x\hat{\sigma}_x$ и $\hat{l}_y\hat{\sigma}_y$, отвечающие за смешивание состояний с противоположным спином, открывают возможность дополнительной $1s-1p$ -гибридизации в зоне проводимости. При этом компонента орбитального момента \hat{l}_z остается выделенной среди прочих в силу того, что оператор $\hat{l}_z\hat{\sigma}_z$ не может смешивать состояния с противоположными спинами, что приводит, в свою очередь, к выделенной роли z -направления не только в обратном пространстве, но и в пространстве огибающих функций, а вместе с ним и к выделенной роли $1s-1p_z$ -гибридизованной волновой функции. Здесь подчеркнем, что такая «выделенность», однако, связана с выбором спинового базиса, другими словами, является следствием долиной анизотропии спинового смешивания.

Таким образом, СОВ сохраняет иерархию энергетических уровней в зоне проводимости, однако приводит к формированию смешанных по спину волновых функций. Используя

решение, приведенное в [77], и учитывая недиагональные блоки в (2.9) как возмущение, получим, что в долине, ориентированной в направлении a \mathbf{k} -пространства, СОВ подмешивает к основному $1s-1p_a$ -связывающему электронному состоянию в КТ пару $1p_b-1p_c$ -гибридизованных состояний (как связывающее – первое возбужденное в зоне проводимости, так и антисвязывающее, которое расположено достаточно высоко по энергии). Именно индуцированное межзонным СОВ смешивание с первым возбужденным состоянием является наиболее существенным в формировании спиновой структуры основного состояния.

В качестве количественного критерия, определяющего модификацию электронных состояний в КТ посредством межзонной спин-орбитальной связи, используем безразмерный параметр b_{so} [60]. В рамках метода огибающей можно положить, что в (2.4) базисные блоховские функции являются скалярами, а отвечающие им компоненты огибающей – нетривиальными спинорами. При этом, в силу отмечавшегося выше сохранения орбитального вырождения в точке X , четырехкратно вырожденному (без учета долин) основному состоянию в зоне проводимости будет отвечать пара сопряженных по Крамерсу [59] двухкомпонентных огибающих. В таком случае определим b_{so} как отношение средних по объему кристаллита значений квадратов модулей меньшей и большей компонент спинора. В результате, вследствие эффекта размерного квантования b_{so} становится функцией R . Ниже под b_{so} будем понимать параметр межзонного спинового смешивания, рассчитанный для основного состояния в зоне проводимости КТ.

На Рисунке 3 приведена зависимость $b_{so}(R)$ в диапазоне от 1 до 3 нм. Параметр b_{so} представлен отдельно для продольной (z) – b_{so}^z – и для поперечной к оси квантования спина долины (x или y) – $b_{so}^{x(y)}$. Необходимость независимого вычисления b_{so} в различных долинах обусловлена сохранением долиной анизотропии спинового смешивания и в НК, которая приводит здесь (в пределах точности учета нами диагональных и недиагональных по спину индуцированных СОВ вкладов в эквивалентный гамильтониан) к простому соотношению

$$b_{so}^z(R) = 2b_{so}^{x,y}(R). \quad (2.21)$$

Расчеты, в которых принято во внимание взаимодействие основного состояния с парой $1p-1p$ -гибридизованных состояний, показывают, что b_{so}^z в КТ изменяется с ростом R от 1 до 3 нм практически линейно в диапазоне от $\sim 0.5 \cdot 10^{-5}$ до $\sim 2.5 \cdot 10^{-5}$ (см. Рисунок 3).

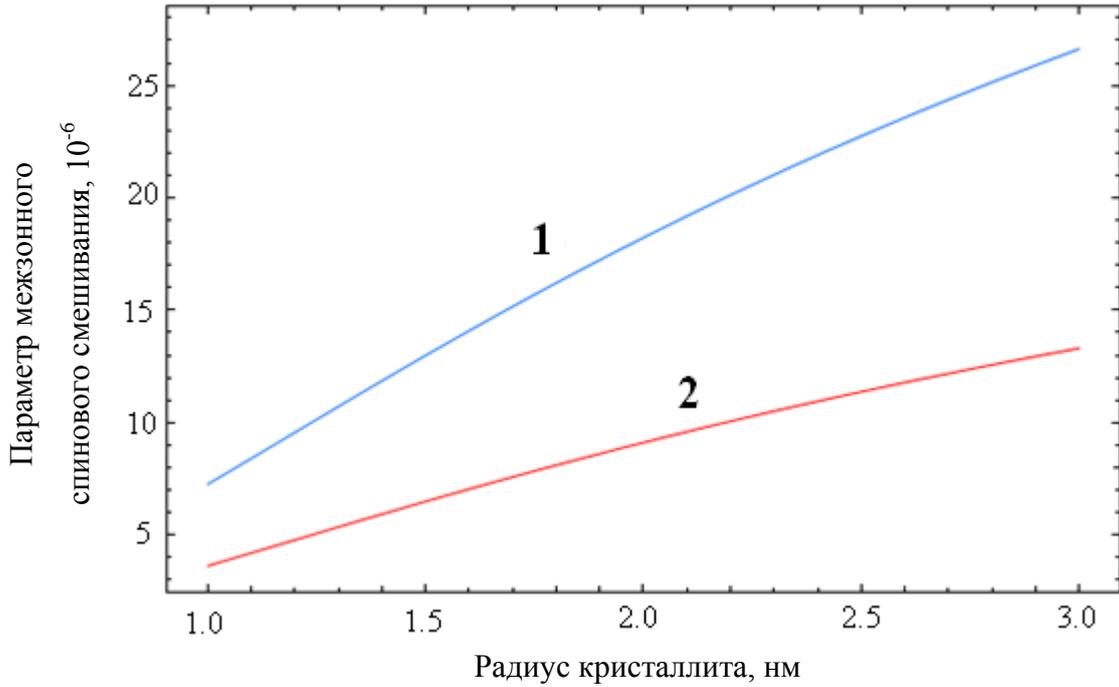


Рисунок 3 – зависимость $b_{so}(R)$ в кремниевых НК в продольной (1) и поперечной (2) по отношению к оси квантования спина долине.

Результаты вычисления $b_{so}^a(R)$, $a = x, y, z$, допускают хоть и, со строго математической точки зрения, приближенное, но количественно достаточно точное и, при этом, довольно простое аналитическое описание. Для этого необходимо, во-первых, учесть, что антисвязывающее $1p-1p$ -гибридизованное состояние отщепляется довольно высоко, и вносит малый вклад в результат расчета. Во-вторых, в смешивании с первым возбужденным состоянием участвует только $1s$ -компонента волновой функции основного состояния, которая, тем не менее, доминирует в огибающей, отвечающей основному состоянию. Из этих соображений b_{so}^z с хорошей точностью может быть определен как

$$b_{so}^z(R) \approx \frac{2Q^2 |P_{sp}|^2}{(E_p - E_0)^2}, \quad (2.22)$$

где E_0 и E_p – энергии основного $1s-1p_z$ -гибридизованного состояния гамильтониана $\hat{H}_{\uparrow\uparrow}^z$ и $1p$ -уровня гамильтониана нулевого приближения \hat{H}_{0CB}^z соответственно, а P_{sp} – матричный элемент оператора проекции импульса \hat{p}_b между состояниями, описываемыми огибающими функциями $1s$ - и $1p_b$ -типа. В рассматриваемой нами модели бесконечно глубокой сферической потенциальной ямы

$$E_p = \frac{\hbar^2 \mu_1^2}{2m_{aver} R^2}, \quad (2.23)$$

$$|P_{sp}| = \frac{2\pi \hbar \mu_1}{\sqrt{3}(\mu_1^2 - \pi^2)R}, \quad (2.24)$$

где $\mu_1 \approx 4.49$ – первый ненулевой корень сферической функции Бесселя $j_1(x)$ своего аргумента, а энергия E_0 как функция радиуса кристаллита определена в [77] (она имеет более громоздкое строение, поэтому здесь мы ее не приводим). Для волновых функций в базисе X -точек на направлениях $[1\ 0\ 0]$ и $[0\ 1\ 0]$ зоны Бриллюэна b_{SO} имеет вдвое меньшее значение:

$$b_{SO}^{x,y}(R) \approx \frac{Q^2 |P_{sp}|^2}{(E_p - E_0)^2}. \quad (2.25)$$

Наконец, в общем случае, когда волновая функция имеет вид (2.4) и представляет собой суперпозицию состояний нескольких X -точек, параметр b_{SO} может быть вычислен как

$$b_{SO}(R) = \sum_{a=x,y,z} b_{SO}^a(R) \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (|C_{a\sigma}|^2 + |C'_{a\sigma}|^2), \quad (2.26)$$

другими словами, сам определяется как «суперпозиция» b_{SO} для состояний в различных долинах. Формула (2.26) соответствует усреднению по долинам в НК, обсуждавшемуся в разделе 2.2 для объемного Si.

Именно параметр b_{SO} будет, в конечном счете, определять интенсивность релаксационных спиновых явлений внутри кристаллита и при электронном переносе из одного НК в другой. В отличие, например, от энергетических характеристик, b_{SO} в кремниевых КТ возрастает как функция R . Качественно такая функциональная связь с размером кристаллита объясняется сближением уровней основного и возбужденного состояний с увеличением R и, соответственно, возрастанием эффективного смешивания состояний с отличным на единицу орбитальным моментом. Полученная зависимость $b_{SO}(R)$, в частности, указывает на то, что с уменьшением размера НК должна снижаться вероятность нестационарных процессов, идущих с переворотом спина. В целом, результаты наших расчетов указывают на возможность управления спин-зависимыми явлениями в уединенных НК и их ансамблях посредством изменения размера кристаллитов.

2.4. Заключительные замечания по Главе 2

Обсудим точность и границы применимости полученного результата. Выполненные расчеты основного состояния в зоне проводимости кремниевых КТ учитывают взаимодействие

оггибающих $1s$ -типа только с «соседними» $1p$ -функциями, игнорируя прочие p -орбитали. Тем не менее, точность расчета высока, поскольку смешивание возникает только для состояний с орбитальными моментами оггибающей, различающимися на единицу, а p -состояния, отличные от первого, достаточно далеко отстоят по энергии от основного [77]. Относительная поправка к рассчитанным $b_{so}^a(R)$, $a = x, y, z$, связанная с учетом прочих p -состояний, не превысит нескольких процентов.

Оценим теперь, для кристаллитов каких размеров применима предложенная теория. Согласно [85] приближение оггибающей функции плохо обосновано для КТ с малыми R , что связывается авторами этой работы, во-первых, с нарушением однозонного приближения в эквивалентном гамильтониане типа (1.45) и, во-вторых, с отклонением потенциальной энергии в малых кристаллитах от функции типа (2.1). Рассчитанная в методе оггибающей функции энергия основного электронного состояния в НК Si при $R = 1$ нм составляет ~ 1 эВ [86], где k_p -гамильтониан, записанный вблизи точки X_1 зоны проводимости, еще применим. Однако, конечно, потенциальная энергия (2.1), использованная при расчетах в [86], не учитывает эффектов отклонения электронной плотности внутри НК в сравнении с объемным материалом, о которых шла речь в [85]. В результате, в качестве нижней границы применимости полученного результата установим $R = 1$ нм.

С другой стороны, при значительном увеличении R эффекты размерного квантования сами по себе становятся несущественны. Оценки, выполненные на основе данных [77], показывают, что при комнатной T радиус НК, при котором разница в энергиях основного и первого возбужденного состояний становится порядка тепловой энергии $k_B T$ (≈ 0.025 эВ), составляет $R \approx 5$ нм. Таким образом, разработанная теория применима для кремниевых КТ с $1 \leq R \leq 5$ нм.

Как уже неоднократно отмечалось, в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы для электронов в КТ, использованной здесь при расчете квантовых состояний, значения энергии носителей оказываются завышенными [24]. Тем не менее, иерархия состояний и энергетических уровней сохраняется, так что формулы (2.22), (2.25) и (2.26) применимы и в более реалистичной модели кристаллита с конечными разрывами зон на границе с диэлектрической матрицей [86]. Подчеркнем также, что различные малые отклонения потенциала (2.1) в НК от сферически симметричного (отклонения его формы от сферической и огранка, поверхностные дефекты и т.д.) не приведут к существенному изменению полученного результата для $b_{so}(R)$. Система уровней в КТ может измениться, но спиновое смешивание между ними сохранится, поскольку, в конечном счете, оно обусловлено кристаллическим СОВ Si.

В заключение Главы 2 подчеркнем, что представленная теория показывает принципиальную невозможность выбора базисных функций в зоне проводимости кремниевых НК в виде «чистых» по спину. Необходимость описания собственных состояний гамильтониана (2.9) в терминах спинового смешивания и, соответственно, введение параметра b_{SO} связаны с тем, что в системах с СОВ спин перестает быть «хорошим» квантовым числом (оператор спина не коммутирует с оператором Гамильтона) [59]. Тем не менее, в ряде случаев эффективный гамильтониан коммутирует по крайней мере с одной из проекций спина [87], другими словами, его собственные функции могут быть выбраны «чистыми» по спину. Покажем здесь, что гамильтониан (2.9) не коммутирует ни с одной из компонент вектора спина.

Для этого, во-первых, в исходном базисе $\{X_{1a}^{(1)} \uparrow, X_{1a}^{(2)} \uparrow, X_{1a}^{(1)} \downarrow, X_{1a}^{(2)} \downarrow\}$ запишем вклад в (2.9), индуцированный кристаллическим СОВ, включая (2.20):

$$\delta\hat{H}_{CB}^z(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\hat{p}_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_+ \\ -\hat{p}_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{p}_- & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\delta\hat{H}_{CB}^{x,y}(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} -\hat{p}_{y,x} & 0 & \hat{p}_z & 0 \\ 0 & \hat{p}_{y,x} & 0 & -\hat{p}_z \\ \hat{p}_z & 0 & \hat{p}_{y,x} & 0 \\ 0 & -\hat{p}_z & 0 & -\hat{p}_{y,x} \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

Далее переставим элементы в (2.28) и (2.29), чтобы они соответствовали выбору блоховского базиса в виде $\{X_{1a}^{(1)} \uparrow, X_{1a}^{(1)} \downarrow, X_{1a}^{(2)} \uparrow, X_{1a}^{(2)} \downarrow\}$:

$$\delta\hat{H}_{CB}^z(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} 0 & -\hat{p}_+ & 0 & 0 \\ -\hat{p}_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_+ \\ 0 & 0 & \hat{p}_- & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

$$\delta\hat{H}_{CB}^{x,y}(\mathbf{r}) = Q \begin{pmatrix} -\hat{p}_{y,x} & \hat{p}_z & 0 & 0 \\ \hat{p}_z & \hat{p}_{y,x} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{p}_{y,x} & -\hat{p}_z \\ 0 & 0 & -\hat{p}_z & -\hat{p}_{y,x} \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Гамильтониан (2.30) может быть записан как:

$$\delta\hat{H}_{CB}^z(\mathbf{r}) = Q(\hat{p}_y \hat{\sigma}_y - \hat{p}_x \hat{\sigma}_x) \otimes \hat{\tau}_z, \quad (2.32)$$

где $\hat{\tau}_z$ – z -матрица Паули, действующая в базисе $\{X_{1a}^{(1)}, X_{1a}^{(2)}\}$. Оператор $\hat{p}_y \hat{\sigma}_y - \hat{p}_x \hat{\sigma}_x$ не коммутирует ни с одной из проекций спина [87], поэтому ни для (2.32), ни, вместе с ним, для

эффективного гамильтониана \hat{H}_{CB}^z нельзя выбрать «чистые» по спину собственные функции. То же по аналогии доказывается и для $\hat{H}_{CB}^{x,y}$ с помощью (2.31).

2.5. Выводы по Главе 2

1. Волновые функции электронов в НК Si являются нетривиальными двухкомпонентными спинорами, что обусловлено слабым кристаллическим СОВ, приводящим к межзонной спин-орбитальной связи зоны проводимости и валентной зоны. При этом в рамках приближения огибающей можно положить, что базисные блоховские функции являются скалярами, в то время как спиновую структуру квантовых состояний описывают отвечающие им компоненты огибающей.

2. Межзонная спин-орбитальная связь дополнительно к смешиванию огибающих функций $1s$ - и продольного $1p$ -типа, связанному с анизотропией кремниевой электронной структуры вблизи дна зоны проводимости, подмешивает к $1s$ -функциям еще и поперечные $1p$ -орбитали, включая и те, что характеризуются противоположным значением проекции спина. Такое смешивание обладает долиной анизотропией: вдоль оси квантования спина оно вдвое больше, чем в направлениях, ей перпендикулярных.

3. Параметр спинового смешивания, фактически характеризующий неопределенность спиновой проекции в электронном состоянии, в НК Si является возрастающей функцией их радиуса в диапазоне от 1 до 5 нм.

Глава 3. Теория модификации g -фактора электронов проводимости в кремнии в результате взаимодействия с фононами и примесными центрами

Одно из направлений реализации спиновых приборов может быть условно объединено в так называемую магнитную спинтронику, где управление спиновой степенью свободы носителей осуществляется посредством приложения магнитного поля. Как известно, во внешнем магнитном поле $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ в гамильтониане электрона появляется дополнительное слагаемое – член Зеемана (см., например, [83]), – характеризующее линейный парамагнитный отклик спиновой подсистемы на внешнее воздействие:

$$\hat{H}_Z = \frac{g}{2} \mu_B \mathbf{B}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (3.1)$$

где безразмерный параметр g – электронный фактор Ландэ (g -фактор), количественно определяющий связь зеемановского расщепления вырожденного по спину уровня энергии с величиной приложенного магнитного поля. Отклонение одноэлектронного фактора Ландэ в полупроводнике от g_0 определяется кристаллическим полем [41, 46]. Как отмечалось в Главе 1, помещение полупроводника во внешнее магнитное поле приводит, помимо возникновения спинового расщепления электронных состояний, описываемого гамильтонианом (3.1), к квантованию циклотронных орбит и появлению уровней Ландау. Однако такой диамагнитный отклик в полупроводнике будет существенным только в сильных полях [46]. Далее в Главе 3 магнитное поле положим слабым в том смысле, что квантованием Ландау можно пренебречь.

Прецизионное знание g -фактора необходимо для осуществления управляемого воздействия на спиновые состояния электронов. Основным методом определения фактора Ландэ электронов проводимости в Si ввиду непрямозонности его энергетической структуры до сих пор остается традиционная спектроскопия ЭСР, в которой g устанавливается из положения резонансной линии поглощения. При этом, конечно, находится, строго говоря, не одноэлектронная, а средняя по ансамблю характеристика. Как показывают многочисленные данные исследования ЭСР [21, 22, 88–90], наблюдаемый электронный фактор Ландэ в Si существенным образом зависит от T , химической природы и концентрации легирующей донорной примеси. В этой главе будет представлена оригинальная теория, позволяющая описать экспериментально наблюдаемые температурную и концентрационную зависимости g -фактора электронов проводимости в Si.

Добавим, что магнитные поля, применяемые для спектроскопии ЭСР, обладают высокой степенью пространственной однородности, поэтому далее всюду при решении задачи внешнее магнитное поле полагается однородным.

3.1. Обзор литературы по проблеме температурной зависимости g -фактора электронов проводимости в кремнии

ЭСР электронов проводимости в полупроводниках впервые был осуществлен, по-видимому, именно в Si в работах [91, 92]. Измерения, проводившиеся в широком температурном диапазоне от 4 до 300 К, показали «устойчивость» положения резонансной линии (электронного g -фактора) к изменению T в пределах погрешности ($\sim 10^{-3}$). Результаты этих и последующих экспериментов [19, 93] продемонстрировали, что, во-первых, в Si сдвиг g относительно g_0 составляет всего лишь несколько тысячных, и, во-вторых, положение максимума поглощения радиочастотного излучения не проявляет температурной зависимости. Экспериментальные данные работ [19, 91–93] предопределили направление развития теоретических исследований электронного g -фактора в Si – его расчет для состояний вблизи дна зоны проводимости с помощью $k\cdot p$ -метода, в рамках которого СОВ принимается в рассмотрение как возмущение [18]. Достаточно подробный обзор работ, посвященных теоретическому изучению электронного g -фактора с помощью подходов, развитых в зонной теории твердых тел, можно найти в [59].

Тем не менее, последующие более детальные исследования спектров ЭСР в Si показали, что наблюдаемое положение линии поглощения радиочастотного излучения в однородном стационарном магнитном поле все-таки меняется с ростом T в отличие, например, от результатов первых работ [91, 92] или достаточно точных исследований Феера [19]. Первое сообщение об этом появилось, по-видимому, в работе [88]. Авторами было установлено, что в температурном диапазоне от ~ 270 до ~ 450 К g -фактор электронов проводимости в образцах Si с различной степенью легирования P вплоть до концентраций, близких к фазовому переходу металл-изолятор, уменьшается практически линейно с коэффициентом пропорциональности $\sim 4.5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. В [88] была выдвинута гипотеза, что температурная зависимость g -фактора обусловлена модуляцией СОВ электрон-фононным взаимодействием, и даже приведены некоторые оценки такого сдвига.

Позднее еще более детальные исследования ЭСР в Si, допированном P на уровне $(1.7 \pm 0.1) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, показали, что положение резонансной линии меняется в довольно широком температурном диапазоне от 1.6 до 300 К [21]. Значение $g = 1.99868 \pm 0.00003$, наблюдавшееся при $T = 1.6$ К, в пределах погрешности совпадало с g -фактором «свободных» носителей Феера [19]. Следует также заметить, что образец Si с примесью P (Si:P), исследовавшийся в [21], был легирован практически на том же уровне, что и в работе [19].

Авторы работы [21] условно разделили весь температурный диапазон на два промежутка: первый от 1.6 до ~ 80 К, где наблюдается преимущественно монотонный рост электронного фактора Ландэ; второй – от ~ 80 К и выше, где значение g -фактора монотонно уменьшается с увеличением T . Предполагается, что в первом температурном диапазоне электроны, участвующие в резонансе, преимущественно локализованы на уединенных донорах или в примесной зоне, а наблюдаемая температурная зависимость связана с их перераспределением и прыжками между локализованными состояниями. При более же высоких T доноры ионизируются, и в эксперименте наблюдается резонансная линия электронов проводимости, для которой сдвиг g -фактора объяснялся возрастающим с увеличением T влиянием спин-релаксационных процессов в результате взаимодействия с фононным резервуаром. При $T \sim 100$ К установленный авторами [21] электронный фактор Ландэ $g \approx 1.9989$.

Еще в [88] было замечено, что изменение концентрации доноров в образце приводит к заметному сдвигу резонансной кривой ЭСР фактически вне зависимости от T . Более основательному исследованию этого вопроса была посвящена работа [89], авторами которой обнаружено, что в образцах Si:P, легированных на уровне $\sim 5 \cdot 10^{15}$ см⁻³, т.е. на 3 порядка меньше, чем в выше цитированных работах, g -фактор электронов проводимости при $T \sim 150$ К составляет 1.9995 ± 0.0001 . Тот же результат был получен при низкотемпературном исследовании спинового резонанса оптически возбужденных носителей. Таким образом, в [89] показано, что легирование мелкими донорами приводит к уменьшению электронного фактора Ландэ, что становится заметным при концентрациях примеси $\sim 10^{18}$ см⁻³. Что же касается температурной зависимости g -фактора электронов проводимости, то авторами [89] при имевшейся сравнительно низкой концентрации примеси она не наблюдалась.

Проведенные в последнее время детальные исследования ЭСР электронов проводимости в Si n -типа, легированного донорами различной химической природы и разной концентрации [22, 90], показали, что g -фактор электронов проводимости является функцией T в широком диапазоне от ~ 80 до ~ 300 К. Подобно авторам [88], в [22, 90] было предположено, что этот эффект связан с модуляцией СОВ колебаниями решетки. Кроме того, в [22, 90], как и в [88, 89], наблюдалась зависимость положения резонансной линии ЭСР от концентрации и химической природы легирующей примеси.

Заметим, что в других полупроводниках наблюдаемый g -фактор электронов проводимости также проявляет зависимость от T [94]. Этот вопрос достаточно активно (как экспериментально, так и теоретически) исследовался в различных полупроводниковых соединениях III-V. Существует несколько точек зрения на эту проблему: влияние сильного СОВ и непараболичности спектра [95], перераспределение электронов проводимости между

уровнями Ландау [96, 97], а также изменение с ростом T таких характеристик, как ширина запрещенной зоны и межзонные матричные элементы оператора импульса (параметры Кейна) [98].

Тем не менее, в работах [95–98] изучались только прямозонные нецентросимметричные полупроводники со сравнительно сильным СОВ, находящиеся при этом в квантующем магнитном поле. Полноценного теоретического анализа температурной зависимости положения линии ЭСР (электронного g -фактора) в Si по нашим сведениям ранее не проводилось. Этому и посвящена Глава 3.

3.2. Квантовые состояния вблизи дна зоны проводимости объемного кремния в присутствии слабого внешнего однородного магнитного поля

Согласно Главе 1 в присутствии слабого внешнего однородного магнитного поля описание квантовых состояний в полупроводнике можно проводить в нотации невозмущенной зонной задачи. В связи с этим электронные состояния будем описывать как блоховские и характеризовать квазиволновым вектором \mathbf{k} . Решение потребуется лишь вблизи дна зоны проводимости, так что номер энергетической зоны в обозначении волновых функций опустим.

Как отмечалось в Главе 2, при учете СОВ электронные состояния вблизи дна зоны проводимости Si не характеризуются определенной проекцией спина, а отвечающие им блоховские функции являются нетривиальными двухкомпонентными спинорами и могут для состояния с квазиволновым вектором \mathbf{k} быть записаны в виде:

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{k}}^{(1)} \\ \varphi_{\mathbf{k}}^{(2)} \end{pmatrix} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Обсуждавшийся в Главах 1 и 2 параметр межзонного спинового смешивания b_{so} вблизи дна зоны проводимости объемного Si определяется соотношением между

$$d_{\mathbf{k}}^{(1)} = \int_{\Omega_0} d\mathbf{r} |\varphi_{\mathbf{k}}^{(1)}|^2, \quad (3.3)$$

$$d_{\mathbf{k}}^{(2)} = \int_{\Omega_0} d\mathbf{r} |b_{\mathbf{k}}|^2. \quad (3.4)$$

Ввиду малой величины межзонной спин-орбитальной связи в Si одна из величин (3.3) или (3.4) оказывается существенно больше второй. Если $d_{\mathbf{k}}^{(1)} \gg d_{\mathbf{k}}^{(2)}$, то о квантовом состоянии с волновой функцией (3.2) говорят как о состоянии с эффективным (или обобщенным) спином «вверх» (“ \uparrow ”); в противном случае (3.2) отвечает состоянию с эффективным спином «вниз» (“ \downarrow ”) [60]. Вводимый таким образом эффективный спин имеет, по сути, смысл квантового

числа полного момента j блоховских состояний в орбитально невырожденной зоне при учете спин-орбитальной связи с другими, вырожденными, зонами. Далее, поскольку зона орбитально невырожденная, проекции эффективного спина будем характеризовать парой «квантовых чисел» $\lambda = \pm 1/2$, где положительный знак отвечает спину «вверх», а отрицательный – спину «вниз». Волновую функцию состояния с квазиволновым вектором \mathbf{k} и проекцией эффективного спина $\lambda = 1/2$ обозначим как $\psi_{\mathbf{k}\uparrow}$, а состояния с \mathbf{k} и $\lambda = -1/2$ – как $\psi_{\mathbf{k}\downarrow}$. Поскольку Si является centrosymmetric полупроводником, в отсутствие внешнего магнитного поля состояния с противоположными проекциями (эффективного) спина обладают одинаковыми энергиями (спиновое вырождение) [59]:

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}). \quad (3.5)$$

Слабое внешнее магнитное поле \mathbf{B} нарушает симметрию по отношению к обращению времени: квазиволновой вектор \mathbf{k} преобразуется в эффективный $\mathbf{K} = \mathbf{k} + e_0 \mathbf{A}/c\hbar$, а в энергии электрона появляется дополнительное зеемановское слагаемое $g(\mathbf{K})\mu_B B\lambda$, которое приводит к снятию спинового вырождения. В зеемановском члене учтено, что одноэлектронный фактор Ландэ является функцией квазиволнового вектора в зоне Бриллюэна, однако в рамках теории линейного отклика магнитозависимой поправкой $e_0 \mathbf{A}/c\hbar$ в $g(\mathbf{K})$ следует пренебречь:

$$g(\mathbf{K}) \approx g(\mathbf{k}). \quad (3.6)$$

В общем случае электрон в каждом квантовом состоянии может обладать своим откликом на внешнее магнитное поле, что отражено в дисперсии одночастичного g -фактора. Кроме того, формально такой одноэлектронный фактор Ландэ может являться еще и функцией проекции электронного спина. Однако из соображений симметрии это может быть справедливо только в материалах без центра инверсии, к которым Si не относится.

Одной из возможных причин экспериментально наблюдаемой температурной зависимости положения максимума поглощения в спектроскопии ЭСР является как раз наличие дисперсии фактора Ландэ.

3.3. Наблюдаемый g -фактор электронов проводимости: связь с одноэлектронными параметрами

В экспериментах по ЭСР значение электронного фактора Ландэ извлекается из положения максимума линии резонансного поглощения. Будем отождествлять его со средней энергией поглощенных фотонов $2\pi \hbar \nu$, которая может быть рассчитана как отношение полной поглощенной энергии E_{abs} к числу поглощенных фотонов N_{abs} :

$$2\pi \hbar \nu = E_{abs} / N_{abs} . \quad (3.7)$$

Знаменатель этой дроби определяется разницей населенностей электронных состояний со спином «вниз» и спином «вверх» во внешнем магнитном поле:

$$N_{abs} \sim \sum_{\mathbf{k} \in B.z.} W_{\mathbf{k}\downarrow}^B - W_{\mathbf{k}\uparrow}^B , \quad (3.8)$$

где $W_{\mathbf{k}\lambda}$ – функция распределения электронов в состоянии с квазиволновым вектором \mathbf{k} и проекцией эффективного спина λ , а $W_{\mathbf{k}\lambda}^B$ – то же в присутствии внешнего однородного постоянного магнитного поля \mathbf{B} . Суммирование в (3.8) в общем случае выполняется по всей зоне Бриллюэна, однако очевидно, что вносить вклад будут только состояния вблизи минимума энергии. В свою очередь, E_{abs} зависит еще и от энергии фотонов, поглощаемых электронами с сопутствующим переворотом спина:

$$E_{abs} \sim \sum_{\mathbf{k} \in B.z.} g(\mathbf{k}) \mu_B B (W_{\mathbf{k}\downarrow}^B - W_{\mathbf{k}\uparrow}^B) . \quad (3.9)$$

В случае не слишком высокой интенсивности электромагнитной накачки образца, числа заполнения электронов $W_{\mathbf{k}\lambda}^B$ можно заменить на их равновесные значения, описываемые распределением Ферми-Дирака. В таком случае в слабом внешнем поле справедливо

$$W_{\mathbf{k}\downarrow}^B - W_{\mathbf{k}\uparrow}^B \approx g(\mathbf{k}) \mu_B B \cdot dW_{\mathbf{k}} / d\varepsilon , \quad (3.10)$$

где учтено, что в отсутствие зеемановского члена энергия электрона вырождена по спину. Подставляя (3.7) – (3.9) в (3.10), заменяя \mathbf{K} на \mathbf{k} [59], получим для наблюдаемого g -фактора

$$g(T) = 2\pi \hbar \nu / \mu_B B \quad (3.11)$$

следующее выражение:

$$g(T) \approx \frac{\sum_{\mathbf{k} \in B.z.} g^2(\mathbf{k}) dW_{\mathbf{k}} / d\varepsilon}{\sum_{\mathbf{k} \in B.z.} g(\mathbf{k}) dW_{\mathbf{k}} / d\varepsilon} . \quad (3.12)$$

Как видно, если дисперсия $g(\mathbf{k})$ в системе является заметной, то перераспределение электронов проводимости по квантовым состояниям с ростом T может приводить к сдвигу максимума поглощения. Тем не менее, такое детальное описание в большей степени оправдано в металлах, где электроны заселяют состояния вблизи поверхности Ферми, и дисперсия g -фактора может существенным образом определяться ее топологией [99], либо в узкозонных полупроводниках с сильным СОВ, таких, как антимонид индия, где \mathbf{k} -зависимость фактора Ландэ может быть достаточно сильной даже вблизи минимума зоны проводимости [100]. В Si же, вследствие слабости СОВ, дисперсией g -фактора для состояний вблизи дна зоны проводимости, которые преимущественно заселены электронами, можно пренебречь вплоть до комнатной T (сравните с дисперсией параметра b_{SO} вблизи дна зоны проводимости,

приведенной в [60]). В эксперименте же, напротив, температурная зависимость положения линии ЭСР электронов проводимости наблюдается, начиная с ~ 80 К. В таком случае справедливым оказывается следующее соотношение:

$$g(T) \approx g(\mathbf{k}_{0j}), \quad (3.13)$$

где \mathbf{k}_{0j} – положение j -ого из шести энергетического минимума зоны проводимости в \mathbf{k} -пространстве.

Таким образом, можно заключить, что в достаточно широком температурном диапазоне наблюдаемый сдвиг электронного фактора Ландэ в Si связан со сдвигом одноэлектронного g -фактора на дне зоны проводимости. Последнее в свою очередь может быть обусловлено взаимодействием электронов вблизи минимума энергии с колебаниями решетки, которое приводит, например, к смещению дна зоны проводимости и температурной зависимости ширины запрещенной зоны Si [101], конечному времени жизни электронных состояний [102] и увеличению эффективной массы электронов проводимости с ростом T [103].

Перед нахождением температурной поправки к одноэлектронному g -фактору вблизи дна зоны проводимости Si сделаем важное замечание: ввиду анизотропии изоэнергетических долин величина $g(\mathbf{k}_{0j})$ вблизи каждого минимума является, строго говоря, не скалярной характеристикой, а тензором 2-ого ранга, обладающим в собственном базисе продольной g_{\parallel} и двумя равными поперечными g_{\perp} по отношению к оси симметрии Δ -долины компонентами фактора Ландэ [18]. В ненапряженных кристаллических образцах электроны равномерно распределены по энергетическим долинам, поэтому экспериментально наблюдаемое значение g -фактора является результатом усреднения по всем шести долинам зоны проводимости:

$$g = \frac{1}{3}g_{\parallel} + \frac{2}{3}g_{\perp}. \quad (3.14)$$

Далее для удобства положим, что магнитное поле ориентировано вдоль одной из долин, другими словами, параллельно одному из кристаллографических направлений типа $[0\ 0\ 1]$.

3.4. Теория перенормировки g -фактора электронов проводимости при взаимодействии с полем фононов

Первоначально рассмотрим модификацию электронного спектра колебаниями решетки в отсутствие магнитного поля. Для расчета энергий одночастичных возбуждений в зоне проводимости используем формализм равновесной функции Грина (ФГ) при ненулевой температуре [104]. Будем рассматривать запаздывающую ФГ, зависящую от комплексной

частоты ω и волнового вектора \mathbf{k} , которая в системе с взаимодействием в общем случае может быть записана в следующем виде:

$$G^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \Sigma^*(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (3.15)$$

где $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})$ – одночастичный спектр в отсутствии взаимодействия, а $\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega)$ – неприводимая собственнo-энергетическая функция, полностью учитывающее взаимодействие. Собственнo-энергетическая часть в общем случае является величиной комплексной, приводя как к сдвигу, так и к конечному времени жизни квазичастичных возбуждений. В данном случае $\Sigma^*(\mathbf{k}, \omega)$ описывает усредненное по большому каноническому ансамблю влияние термического беспорядка на одночастичный спектр системы.

Для применения техники ФГ в задачах электронной теории металлов обычно требуется, чтобы энергия возбуждений над уровнем Ферми (или, при ненулевой T , химическим потенциалом) была много меньше энергии Ферми [105]. При анализе электронных свойств полупроводников критерием применимости (3.15) является малость энергии возбуждений над уровнем Ферми (или химпотенциалом) в сравнении с шириной валентной зоны. Если электронные состояния заселены лишь вблизи дна зоны проводимости, то их энергии относительно химического потенциала, расположенного внутри запрещенной зоны в нелегированном или слабо легированном полупроводнике, составляют величину порядка половины ширины запрещенной зоны. Запрещенные зоны в полупроводниках (в т.ч. и в Si) обычно гораздо уже разрешенных [106], так что использование формализма ФГ оправдано.

Как известно [104], при ненулевой температуре спектр электронных возбуждений $\xi(\mathbf{k})$ может быть найден как полюс запаздывающей ФГ (3.15):

$$\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) + \Sigma^*(\mathbf{k}, \xi(\mathbf{k})). \quad (3.16)$$

Величина $\xi(\mathbf{k})$ имеет в общем случае отрицательную мнимую часть (полюс запаздывающей ФГ лежит в нижней полуплоскости комплексной плоскости), описывающую конечное время жизни одночастичного возбуждения. Энергии электронных возбуждений $\varepsilon(\mathbf{k})$ определяются как реальная часть функции $\xi(\mathbf{k})$:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) + \text{Re} \Sigma^*(\mathbf{k}, \xi(\mathbf{k})). \quad (3.17)$$

Как показывают расчеты [102], в Si вплоть до $T \sim 400$ К квазичастичные возбуждения вблизи дна зоны проводимости являются хорошо определенными, т.е. $\text{Im}|\xi(\mathbf{k})| \ll \text{Re}|\xi(\mathbf{k})|$. В связи с этим в правой части (3.17) $\xi(\mathbf{k})$ может быть заменена на $\varepsilon(\mathbf{k})$, после чего (3.17) примет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) + \text{Re} \Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon(\mathbf{k})). \quad (3.18)$$

В силу того, что поправка $\text{Re}\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon(\mathbf{k}))$ к электронному спектру является малой, уравнение (3.18) возможно решать методом последовательных приближений, где в качестве нулевого приближения будем использовать

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) + \text{Re}\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})). \quad (3.19)$$

Полученное уравнение (3.19) соответствует приведенному в [107] для перенормировки энергии одноэлектронных возбуждений в полупроводниках. Если возбуждения являются хорошо определенными, то $\text{Re}\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}))$ в (3.19) может быть рассчитана посредством квантово-механической теории возмущений Рэлея-Шредингера [107]:

$$\text{Re}\Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})) = \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}+a\mathbf{q}}|^2 (\mathcal{G}(-a) + aW_{\mathbf{k}+a\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}\eta})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_{\eta}(\mathbf{q})}, \quad (3.20)$$

где $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}$ – матричный элемент рассеяния электрона из состояния с квазиволновым вектором \mathbf{k} в состояние с квазиволновым вектором $\mathbf{k} \pm \mathbf{q}$ с испусканием (нижний знак) или поглощением (верхний знак) фонона с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией η , $\hbar\omega_{\eta}(\mathbf{q})$ и $N_{\mathbf{q}\eta}$ – энергия и числа заполнения таких фононов, а функция распределения $W_{\mathbf{k}}$ отвечает невозмущенному спектру энергий $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})$. В дальнейшем всюду будем считать, что числа заполнения электронов и фононов описываются их равновесными значениями, т.е. функциями распределения Ферми-Дирака и Бозе-Эйнштейна соответственно.

В (3.20) мы ограничились поправкой второго порядка малости по электрон-фононному взаимодействию, чего, в силу слабости последнего, достаточно для надежных количественных расчетов и сравнения с экспериментальными данными [106]. Использование «обычной» квантово-механической теории возмущений позволяет дать следующую простую интерпретацию выражения (3.20): перенормировка энергии электрона возникает в результате виртуальных переходов между начальным состоянием $|\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}\rangle$, промежуточным $|\mathbf{k} \pm \mathbf{q}, \varepsilon^{(0)}\rangle$ и конечным $|\mathbf{k}, \varepsilon\rangle$, в котором электрон имеет тот же импульс, что и в начальном состоянии, однако, как это явно указано, обладает уже другой энергией вследствие наличия возмущения.

В присутствии внешнего магнитного поля уравнение, определяющее перенормировку энергии электрона взаимодействием с колебаниями решетки, принимает вид:

$$\varepsilon(\mathbf{K}) + \lambda g_i(\mathbf{k})\mu_B B = \varepsilon^{(0)}(\mathbf{K}) + \lambda g_i^{(0)}(\mathbf{k})\mu_B B + \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{|V_{\mathbf{K}\lambda\mathbf{K}+a\mathbf{q}\lambda'}^{(i)}|^2 (\mathcal{G}(-a) + aW_{\mathbf{K}+a\mathbf{q}\lambda'}^B + N_{\mathbf{q}\eta})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{K}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{K} + a\mathbf{q}) + (\lambda g_i^{(0)}(\mathbf{k}) - \lambda' g_i^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q}))\mu_B B + a\hbar\omega_{\eta}(\mathbf{q})}, \quad (3.21)$$

где в сравнении с (3.20) $g_i^{(0)}(\mathbf{k})$ и $g_i(\mathbf{k})$ – невозмущенное и перенормированное главные значения g -тензора электрона в состоянии с волновым вектором \mathbf{K} соответственно, где $i = \parallel, \perp$

фактически описывает ориентацию долины, в квантовом состоянии которой находится электрон, относительно внешнего магнитного поля, $V_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}\pm\mathbf{q}\lambda'}^{(i)}$ – спин-зависимый матричный элемент рассеяния электрона из состояния $|\mathbf{K}, \lambda, \varepsilon^{(0)}\rangle$ i -ой (продольной или поперечной относительно внешнего поля) долины в состояние $|\mathbf{K} \pm \mathbf{q}, \lambda', \varepsilon^{(0)}\rangle$. Как видно, в присутствии СОВ мы учли зависимость матричного элемента рассеяния электрона на фононе от ориентации долины исходного электронного состояния, что, как показано в [60], связано с анизотропией спинового смешивания в Si. Эта анизотропия фактически определяет и свойства g -тензора электронов проводимости. Тем не менее, сказываться она будет только в случае переворота спина, т.е. $\lambda' = -\lambda$, в то время как при сохранении проекции спина можно полагать $V_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}\pm\mathbf{q}\lambda}^{(i)} = V_{\mathbf{k}\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}$.

Уравнение (3.21) описывает перенормировку как электронного спектра, так и зеемановского слагаемого. Поправку к электронному фактору Ландэ можно определить, выделив непосредственно перенормировку зеемановского члена. Для этого, пользуясь стандартным условием малости энергии Зеемана в сравнении с зонной энергией электрона, разложим ренормализационный член в правой части уравнения (3.21) в ряд Тейлора по магнитному полю до первого порядка малости включительно. Заметим, что малый параметр содержится как в знаменателе рассматриваемого выражения, так и, неявно, в числах заполнения электронов. В результате, поправка к одноэлектронному g -фактору принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \lambda g_i(\mathbf{k}) \approx & \lambda' g_i^{(0)}(\mathbf{k}) - \\ & - \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{|V_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}+a\mathbf{q}\lambda'}^{(i)}|^2 \left(\mathcal{G}(-a) + aW_{\mathbf{k}+a\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}\lambda} \right) \left(\lambda g_i^{(0)}(\mathbf{k}) - \lambda' g_i^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q}) \right)}{\left(\varepsilon^{(0)}(\mathbf{K}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{K} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\eta(\mathbf{q}) \right)^2} + \\ & + \sum_{\lambda'} \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{a |V_{\mathbf{k}\lambda\mathbf{k}+a\mathbf{q}\lambda'}^{(i)}|^2 \left(dW_{\mathbf{k}+a\mathbf{q}} / d\varepsilon^{(0)} \right) \lambda' g_i^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{K}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{K} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\eta(\mathbf{q})}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Как видно из (3.22), наибольший вклад в поправку к $g_i(\mathbf{k})$ вносят либо состояния, характеризующиеся близкими в обратном пространстве значениями волнового вектора, либо состояния с близкими значениями энергии (при этом они могут быть и удалены в зоне Бриллюэна, как, например, состояния различных электронных Δ -долин в Si). В обоих случаях можно с высокой точностью пренебречь дисперсией одноэлектронного g -фактора и полагать, что $g_i(\mathbf{k}) \approx g_i(\mathbf{k} \pm \mathbf{q})$. Следовательно, в первой сумме в правой части (3.22) ненулевыми оказываются только члены с $\lambda' = -\lambda$. Во второй сумме сохраним слагаемые с $\lambda' = \lambda$, поскольку матричный элемент для рассеяния с переворотом спина много меньше, чем

матричный элемент для бесспинового рассеяния [60]. В результате перенормировка g -фактора электронов проводимости будет определяться выражением:

$$g_i(\mathbf{k}) \approx g_i^{(0)}(\mathbf{k}) - 2g_i^{(0)}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{|V_{\mathbf{k}\uparrow\mathbf{k}+a\mathbf{q}\downarrow}^{(i)}|^2 (\mathcal{G}(-a) + aW_{\mathbf{k}+a\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}\lambda})}{(\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\eta(\mathbf{q}))^2} +$$

$$+ g_i^{(0)}(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{a|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}+a\mathbf{q}}|^2 (dW_{\mathbf{k}+a\mathbf{q}}/d\varepsilon^{(0)})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\eta(\mathbf{q})}, \quad (3.23)$$

где $V_{\mathbf{k}\uparrow\mathbf{k}\pm\mathbf{q}\downarrow}^{(i)}$ – матричный элемент рассеяния электрона на фононе с переворотом спина,

$$|V_{\mathbf{k}\uparrow\mathbf{k}\pm\mathbf{q}\downarrow}^{(i)}| = |V_{\mathbf{k}\downarrow\mathbf{k}\pm\mathbf{q}\uparrow}^{(i)}|.$$

Наконец, в силу (3.13) будем интересоваться g -фактором только в точке экстремума \mathbf{k}_{0i} , отвечающей i -ой долине зоны проводимости:

$$g_i(T) \approx g_i^{(0)} - 2g_i^{(0)} \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{|V_{\mathbf{k}_{0i}\uparrow\mathbf{k}_{0i}+a\mathbf{q}\downarrow}^{(i)}|^2 (\mathcal{G}(-a) + aW_{\mathbf{k}_{0i}+a\mathbf{q}} + N_{\mathbf{q}\lambda})}{(\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q}))^2} +$$

$$+ g_i^{(0)} \sum_{\mathbf{q}\eta} \sum_{a=\pm 1} \frac{a|V_{\mathbf{k}_{0i}\mathbf{k}_{0i}+a\mathbf{q}}|^2 (dW_{\mathbf{k}_{0i}+a\mathbf{q}}/d\varepsilon^{(0)})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i} + a\mathbf{q}) + a\hbar\omega_\lambda(\mathbf{q})}, \quad (3.24)$$

где в правой части использовано (3.6) и введено обозначение

$$g_i^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) \equiv g_i^{(0)}. \quad (3.25)$$

Таким образом, во втором порядке теории возмущений перенормировка g -фактора электронов проводимости колебаниями решетки определяется совокупностью двух слагаемых: первое связано с вкладом процессов рассеяния электронов на фононах с переворотом спина (процессов Эллиотта-Яфета); второе – с неэквивалентностью спин-независимых электронных переходов с противоположной ориентацией спина, связанной с перераспределением электронов по энергиям во внешнем магнитном поле. В (3.24) температурная зависимость компонент электронного g -тензора определяется главным образом числами заполнения электронов и фононов. Расчет усредненного по долинам g -фактора выполняется с помощью (3.14):

$$g(T) = \frac{1}{3} g_{\parallel}(T) + \frac{2}{3} g_{\perp}(T). \quad (3.26)$$

3.5. Температурная зависимость g -фактора электронов проводимости в кремнии: расчет и сравнение с экспериментом

Полученные в предыдущем разделе выражения (3.24) и (3.26) фактически представляют собой рабочие формулы для расчета экспериментально наблюдаемого положения $g(T)$ линии

ЭСР в Si. Качественный анализ не позволяет выявить из общих соображений, какой из двух перенормирующих членов в правой части (3.24) дает больший количественный вклад: если в первом малость вносит матричный элемент электрон-фононного взаимодействия с переворотом спина, то во втором – электронные числа заполнения в невырожденном газе. Кроме того, в знаменателях этих слагаемых присутствуют сингулярности отличных друг от друга степеней. В связи с этим, пользуясь некоторыми «классическими» подходами физики Si [106], попробуем провести аналитический расчет каждого слагаемого в правой части (3.24).

Всю совокупность виртуальных электронных переходов, определяющих перенормировку фактора Ландэ, можно разделить на внутри- и междолинные процессы. Внутридолинные электронные переходы индуцированы взаимодействием с низкоэнергетическими длинноволновыми акустическими фононами с линейным законом дисперсии $\omega_\eta(\mathbf{q}) = v_\eta q$, где v_η – скорость звука для η -поляризованных колебаний решетки, которая, как известно [108], составляет $9.0 \cdot 10^5$ и $5.41 \cdot 10^5$ см/с для продольной и поперечной поляризации соответственно. Энергии фононов, участвующих в междолинных процессах, можно считать фиксированными [109]. Закон дисперсии электронов в каждой долине полагается эллипсоидальным с эффективными массами m_l и m_t .

Для вычисления первой суммы в правой части (3.24) мы пользовались результатами детальных исследований матричных элементов электрон-фононного взаимодействия между состояниями с противоположной ориентацией спина, сделанными в [81]. При расчете второй суммы применялись значения бесспиновых деформационных потенциалов, приведенные в работах [110] и [111] для внутри- и междолинных переходов соответственно. В качестве нулевого приближения $g_i^{(0)}$ в уравнении (3.24) могут быть использованы либо теоретически рассчитанные значения компонент g -тензора электронов проводимости [20, 112], либо измеренные экспериментально при низких T [93], поскольку различия между ними малы и фактически не сказываются на характере вычисленной температурной зависимости. Заметим, однако, что фактор Ландэ электронов проводимости в образцах Si n -типа изменяется в зависимости от концентрации легирующей примеси [88–90] и ее химической природы [22, 90]. При этом сдвиг g -фактора, возникающий в легированном Si, составляет $\sim 0.1\%$ его величины в нелегированных образцах. В связи с этим нам представляется более корректным в качестве усредненного нулевого приближения $g^{(0)}$ использовать экспериментально наблюдаемое низкотемпературное значение фактора Ландэ.

Количественные расчеты показывают, что определяющим для температурной поправки к электронному g -фактору является вклад второго слагаемого в (3.24), в то время как процессы Эллиотта-Яфета составляют только $\sim 0.5\%$ ее величины. Как оказалось, столь существенное

отличие связано в первую очередь с низкой интенсивностью процессов переворота спина в сравнении со спин-независимым рассеянием. Помимо этого, перенормировка g -фактора определяется преимущественно виртуальными междолинными электронными переходами. Результаты расчетов в сравнении с экспериментальными данными представлены на Рисунке 4.

Экспериментальные исследования g -фактора электронов проводились методом ЭСР с применением того же оборудования, что и обсуждавшийся в Главе 1 ЭСР Si:Bi. Использовались образцы Si природного изотопного состава, легированные P и Li на уровне $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, причем концентрации доноров обоих типов были близки, чтобы минимизировать разницу в интенсивностях возможных процессов электронного рассеяния для обоих образцов.

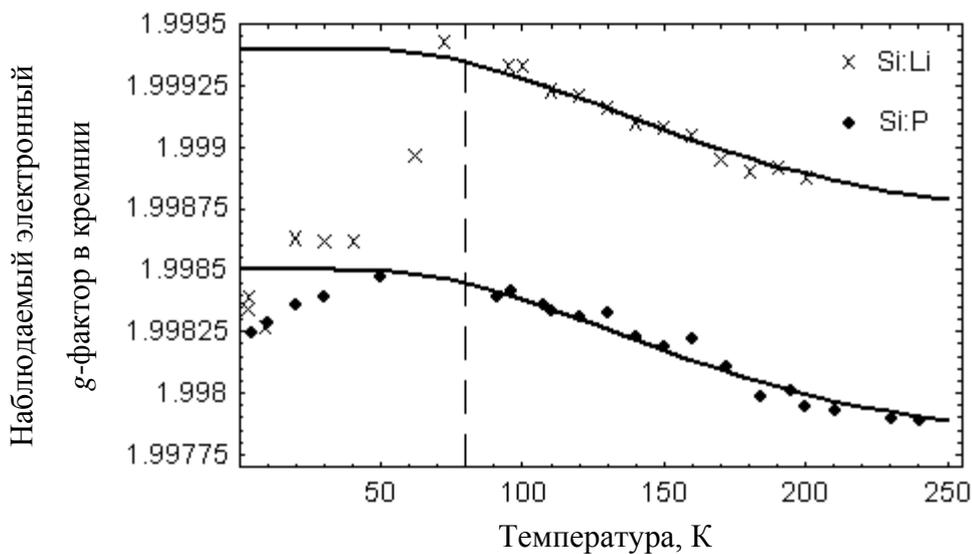


Рисунок 4 – экспериментальные (символами) и соответствующие теоретические (сплошными линиями) температурные зависимости электронного g -фактора для образцов Si, легированных Li (Si:Li) и P (Si:P) с концентрациями $3.7 \cdot 10^{18}$ и $3.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Вертикальная пунктирная линия при 80 К показывает относительную границу между локализованными и «свободными» электронами.

Экспериментальные результаты измерения температурной зависимости g -фактора представлены на Рисунке 4 в совокупности с теоретически рассчитанными кривыми. Как видно, при увеличении T от нуля до ~ 80 К имеет место монотонный рост наблюдаемого значения фактора Ландэ. В этом диапазоне электроны находятся преимущественно в локализованных состояниях уединенных донорных центров или примесной зоны в зависимости от степени легирования. Электроны, связанные на изолированных донорах, распределены по состояниям дискретного энергетического спектра, занимая преимущественно уровни $1s$ состояния: синглетный $1s(A_1)$, дублетный $1s(E)$ и триплетный $1s(T_2)$ [63]. В каждом из них электроны

описываются различными значениями g -фактора, определяемыми главным образом симметрией волновой функции. В таком случае перераспределение электронов между этими состояниями с ростом T может приводить к увеличению наблюдаемого значения фактора Ландэ.

Если же электрон локализован в примесной зоне, то помимо дисперсии одноэлектронного g -фактора в ней, температурная зависимость измеряемого в эксперименте положения линии ЭСР может определяться еще и прыжками между различными локализованными состояниями. Более строгое рассмотрение требует, конечно, расчета электронных g -факторов для каждого из указанных дискретных уровней или для примесной зоны, что, однако, выходит за рамки проблемы, обозначенной в диссертационном исследовании.

При более высоких T доноры становятся преимущественно ионизованными, и электроны делокализуются. При этом качественным образом меняется форма наблюдаемой кривой ЭСР и температурная зависимость положения максимума поглощения – с ростом T максимум практически линейно сдвигается в область более низких значений. Диапазоны, соответствующие преимущественной локализации электронов на своих донорах и преимущественной ионизации примесей, разделены на Рисунке 4 вертикальной штриховой линией при $T = 80$ К.

Для расчета теоретической температурной зависимости g -фактора электронов проводимости для каждого образца использовались экспериментально установленные нами низкотемпературные значения электронных g -факторов $g^{(0)} \approx 1.9985$ и 1.9994 для случаев легирования Р и Li соответственно. Числа заполнения электронов W_k для невырожденного Si n -типа, исследовавшегося в работе, рассчитывались аналогично [113] с учетом $1s$ уровней уединенных примесных центров (теоретические расчеты, произведенные с использованием представления о примесной зоне [114], для указанных здесь концентраций дают очень близкий результат).

Как можно видеть из Рисунка 4, рассчитанное значение g -фактора практически не изменяется в температурном диапазоне от 0 до ~ 80 К, что связано с малыми числами заполнения W_k . Более того, в этом температурном диапазоне сопоставление с экспериментальными данными некорректно, поскольку, как описано выше, в ЭСР в этом температурном диапазоне участвуют локализованные электроны. С другой стороны, при T от ~ 80 до ~ 250 К теоретически рассчитанный g -фактор уменьшается монотонно с ростом температуры, что находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. Температурная зависимость g -фактора в этом диапазоне близка к линейной.

3.6. Зависимость g -фактора электронов проводимости в кремнии от концентрации легирующей донорной примеси

Как видно из Рисунка 4, а также из сравнения с экспериментальными данными работ [22, 88–90], наблюдаемый в эксперименте g -фактор существенным образом зависит от типа и концентрации легирующей донорной примеси. Тем не менее, теория, представленная в разделе 3.4, не позволяет интерпретировать экспериментально наблюдаемый сдвиг положения линии ЭСР при изменении химической природы и концентрации легирующей примеси: при сравнении с экспериментальными данными, представленными на Рисунке 4, его пришлось учитывать эмпирическим путем. Однако понятно, что процессы рассеяния электронов на ионизованных донорах могут приводить к сдвигу g -фактора подобно тому, как это происходит в результате взаимодействия с полем фононов. Опишем этот эффект качественно с применением развитого формализма.

Вернемся к уравнению (3.19) и запишем действительную часть собственно-энергетической функции $\text{Re} \Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}))$ во втором порядке по рассеянию на ионизованных донорах [107]:

$$\text{Re} \Sigma^*(\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k})) = N_d \sum_{\mathbf{k}' \in B.z.} \frac{|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(d)}|^2 (1 - W_{\mathbf{k}'})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}')}, \quad (3.27)$$

где N_d – концентрация доноров в системе, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(d)}$ – матричный элемент, отвечающий виртуальному электронному переходу из исходного состояния $|\mathbf{k}, \varepsilon^{(0)}\rangle$ в промежуточное состояние $|\mathbf{k}', \varepsilon^{(0)}\rangle$. Линейная связь (3.27) с N_d отвечает борновскому приближению в задаче рассеяния.

Во внешнем магнитном поле виртуальные переходы в промежуточные состояния со спином «вверх» и спином «вниз» становятся неэквивалентны из-за разницы в числах заполнения $W_{\mathbf{k}\lambda}^B$ этих состояний. В результате, выполнив преобразования, аналогичные (3.21)–(3.23), получим

$$g_i(\mathbf{k}) \approx g_i^{(0)}(\mathbf{k}) - N_d \sum_{\mathbf{k}' \in B.z.} \frac{|V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(d)}|^2 (dW_{\mathbf{k}'} / d\varepsilon^{(0)}) g_i^{(0)}(\mathbf{k}')}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}')}. \quad (3.28)$$

Поправка в правой части (3.28) эквивалентна второй сумме в правой части (3.23), другими словами, обусловлена неэквивалентностью процессов рассеяния без изменения спинового состояния, связанной с перераспределением электронов во внешнем магнитном поле. Выполняя преобразования (3.28), аналогичные переходу от (3.23) к (3.24), получим

$$\frac{g_i - g_i^{(0)}}{g_i^{(0)}} \approx -N_d \sum_{\mathbf{k}' \in B.z.} \frac{|V_{\mathbf{k}_{0i}\mathbf{k}'}^{(d)}|^2 (dW_{\mathbf{k}'} / d\varepsilon^{(0)})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}')}. \quad (3.29)$$

Из (3.29) следует, что, во-первых, поправка к g -фактору при рассеянии на мелких донорах растет линейно с их концентрацией, во-вторых, зависит от рассеивающего потенциала, определяемого в терминах матричного элемента $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{(d)}$, и, в-третьих, приводит к его отрицательному сдвигу ввиду того, что $\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}') < 0$ ($\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i})$ отвечает минимуму энергии) и $dW_{\mathbf{k}'} / d\varepsilon^{(0)} < 0$ (вблизи равновесия). В результате, g -фактор должен линейно уменьшаться с увеличением концентрации примеси.

На Рисунке 5 представлены результаты измерения методом ЭСР g -фактора электронов проводимости в Si n -типа проводимости с различным уровнем легирования Р и Li в сравнении с теоретическими кривыми, построенными согласно (3.24) и (3.26) как функции температуры и (3.29) как линейная функция концентрации примеси. При вычислениях вклады (3.24) и (3.29) в g -фактор рассматривались аддитивно, при этом температурные зависимости определены количественно, в то время как концентрационная зависимость подбиралась эмпирически: сумма

$\sum_{\mathbf{k}' \in B.z.} \frac{|V_{\mathbf{k}_{0i}\mathbf{k}'}^{(d)}|^2 (dW_{\mathbf{k}'} / d\varepsilon^{(0)})}{\varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}_{0i}) - \varepsilon^{(0)}(\mathbf{k}')}$ в правой части (3.29) была заменена на линейный коэффициент. Как

видно, расчетные кривые и экспериментальные данные находятся в хорошем согласии.

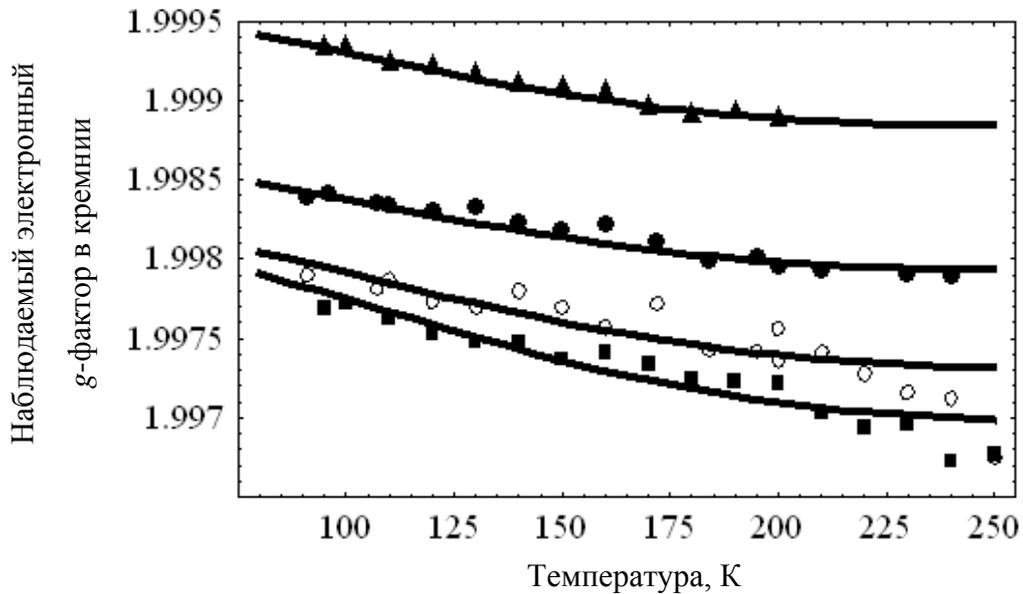


Рисунок 5 – экспериментальные (символами) и соответствующие теоретические (сплошными линиями) температурные зависимости электронного g -фактора для образцов Si n -типа, легированных Р (●, ○, ■) и Li (▲). Концентрации Р и Li составляют $3.3 \cdot 10^{18}$ (●), $9.1 \cdot 10^{18}$ (○), $1.1 \cdot 10^{19}$ (■) и $3.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ соответственно.

3.7. Заключительные замечания по Главе 3

Результаты экспериментальных работ [21, 22, 88, 90] показывают тенденцию к линейному уменьшению g -фактора электронов проводимости с ростом T в диапазоне от ~ 250 К и выше, в то время как теоретические кривые, описываемые выражениями (3.24) и (3.26) буквально выходят на насыщение при таких T . В связи с этим кратко обсудим границы применимости предложенной теории, которые обусловлены двумя основными факторами: ограниченной применимостью построенной теории перенормировки одноэлектронного g -фактора при высоких температурах и уровнях легирования, а также отклонением положения максимума поглощения в ЭСР от одноэлектронного g -фактора вблизи дна зоны проводимости.

Во-первых, по-видимому, ограниченную применимость имеет выражение (3.20) для неприводимой собственно-энергетической функции, полученное в рамках теории возмущений Рэля-Шредингера. С увеличением температуры роль электрон-фононного взаимодействия возрастает, величина собственно-энергетической функции становится существеннее, и выполнен переход от (3.18) к (3.19), при котором отклонение энергии возбуждений от невозмущенного спектра полагалось малым, обладает, по всей видимости, невысокой точностью. Другими словами, (3.20) может быть уже неприменимо при $T \sim 300$ К и выше. Более того, уже отмечалось, что с ростом температуры необходимо учитывать также и конечность времени жизни квазичастичных возбуждений.

Во-вторых, все измерения спектров ЭСР, с результатами которых сопоставлялась теория температурной зависимости g -фактора, выполнялись в легированных образцах Si. В связи с этим интенсивные процессы рассеяния на мелких примесях нужно учитывать согласовано с электрон-фононным взаимодействием (рассеяние на примесях может приводить к отклонению неприводимой собственно-энергетической функции от выражения, полученного в рамках теории возмущений Рэля-Шредингера, уменьшать время жизни квазичастичных возбуждений и т.д.), что было сделано лишь качественно – в выражении (3.29).

Наконец, в рамках разработанной теории не принято во внимание, что ЭСР, строго говоря, – это неравновесное явление, в котором помимо положения максимума резонансной линии необходимо принимать во внимание еще и ее ширину, обусловленную процессами спиновой релаксации. С ростом температуры и концентрации легирующей примеси процессы спиновой релаксации в Si становятся интенсивнее, так что сам по себе расчет положения максимума резонансной линии необходимо проводить согласованно с ее шириной. Более того, с повышением температуры распределение электронов будет размываться по энергии в зоне проводимости, и необходимо принимать во внимание и дисперсию g -фактора, которой мы пренебрегли в (3.12).

Таким образом, опираясь на выше перечисленные факторы, а также на хорошее согласие теории с экспериментом при температурах менее ~ 250 К, будем считать, что предложенная теория описывает экспериментально наблюдаемое изменение g -фактора электронов проводимости в Si в диапазоне $T = 80 \div 250$ К.

3.8. Выводы по Главе 3

1. При невысоких температурах ($T < 300$ К) и уровнях радиочастотной накачки положение максимума поглощения в ЭСР электронов проводимости в Si, зависящее от температуры и концентрации легирующей примеси в образце, может быть отождествлено с одноэлектронным g -фактором на дне зоны проводимости. Для описания наблюдаемой температурной зависимости предложена теория перенормировки g -фактора посредством взаимодействия с полем фононов.

2. Во втором порядке теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию перенормировка одноэлектронного g -фактора определяется совокупностью двух слагаемых: первое обусловлено процессами рассеяния электронов на фононах с переворотом спина (процессов Эллиотта-Яфета); второе – неэквивалентностью во внешнем магнитном поле спин-независимых процессов рассеяния для электронов с противоположной ориентацией спина. Расчеты показывают, что в температурной зависимости g -фактора электронов проводимости доминирует второе слагаемое, в то время как процессы переворота спина второго порядка вносят вклад ~ 0.5 %. При этом, температурная поправка к электронному фактору Ландэ определяется главным образом виртуальными междолинными переходами второго порядка. Выполненные расчеты температурной зависимости g -фактора электронов проводимости в объемном Si находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными в температурном диапазоне от ~ 80 до ~ 250 К.

3. Качественно показано, что g -фактор электронов проводимости в одноэлектронном приближении может уменьшаться в результате взаимодействия с примесными центрами. Поправка к g -фактору обусловлена неэквивалентностью во внешнем магнитном поле виртуальных переходов при рассеянии на ионизованных донорах во втором порядке теории возмущений. В борновском приближении зависимость g -фактора от концентрации доноров оказывается линейной, что согласуется с экспериментальными данными.

Глава 4. Электронные состояния и оптическая щель в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы

Приближение огибающей функции может быть эффективно применено к исследованию квантовых состояний в полупроводниковых НК, внедренных в различные широкозонные диэлектрические матрицы. При этом достаточно простая модель КТ с конечными разрывами зон на гетерогранице полупроводника и диэлектрика позволяет получить хорошие оценки для энергии низкоэнергетических уровней электронов и дырок [24, 86]. В этой главе с применением теории, предложенной в [24, 77] и развитой затем автором диссертационного исследования в [86], будут вычислены энергии основного электронного и дырочного состояний и оптическая щель в кристаллитах *c*-GaN и *w*-GaN сферической формы, внедренных в аморфные диэлектрические матрицы SiO₂, Al₂O₃, нитрида кремния (Si₃N₄) и диоксида гафния (HfO₂).

4.1. Сферические нанокристаллы нитрида галлия в широкозонных диэлектрических матрицах: вводные замечания

НК сферической (а, точнее, близкой к ней) формы в диэлектрических матрицах обычно получают методами ионной имплантации [3]. В этой связи, существуют лишь единичные работы, посвященные ионно-лучевому синтезу и изучению оптических свойств НК GaN в широкозонных матрицах [13, 14].

В [13] исследованы спектры фотолюминесценции (ФЛ) НК GaN в аморфных и монокристаллических матрицах SiO₂ и Al₂O₃, сформированных последовательной имплантацией ионов галлия (Ga) и азота (N) с последующим отжигом в потоке аммиака при 900 °С. Согласно данным просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) НК GaN имели размеры 16±15 нм. Исследования микродифракции показали, что GaN в кристаллитах имел структуру вюрцита. В свою очередь энергии максимумов пиков ФЛ соответствовали ширине запрещенной зоны объемного *w*-GaN. Таким образом, в [13] проявления эффекта размерного квантования для носителей в НК по их оптическим свойствам обнаружено не было.

В [14] изучены спектры ФЛ НК GaN в матрице сапфира (α -Al₂O₃), синтезированных посредством последовательной ионной имплантации Ga и N с последующей термообработкой. Исследования методами ПЭМ, спектроскопии тонкой структуры края поглощения рентгеновского излучения и малоугловой рентгеновской дифракции показали формирование НК GaN в матрице α -Al₂O₃. Было обнаружено голубое смещение (на ≈ 0.22 эВ) максимума линии краевой ФЛ полученных образцов по сравнению с шириной запрещенной зоны

объемного GaN. Модификация оптических свойств была увязана авторами с эффектом размерного квантования в формирующихся НК GaN. Таким образом, экспериментальные данные [14] все-таки указали на возможность формирования сферических КТ GaN в диэлектрических матрицах.

Теоретические исследования электронных и дырочных состояний в сферических КТ как c-GaN, так и w-GaN выполнялись ранее в работе [23] с использованием приближения огибающей функции. Расчеты проводились в двух случаях: в пределе нулевого СОВ в валентной зоне и при его учете. Энергии и волновые функции состояний валентной зоны и зоны проводимости были вычислены как функции R . В НК как со структурой сфалерита, так и вюрцита энергии нижних уровней в обеих зонах убывают обратно пропорционально R , однако наличие расщепления, связанного с кристаллическим полем, в НК со структурой вюрцита приводит к отклонению энергии дырок в них от зависимости $1/R^2$, характерной для энергии размерного квантования в сферических КТ. Учет СОВ модифицирует энергии в валентной зоне и в НК с кубической решеткой, давая эффект, сходный с кристаллическим полем в структуре вюрцита.

Тем не менее, как уже отмечалось во Введении, проведенный в [23] анализ энергетической структуры обладал рядом недостатков, главный из которых – использование приближения бесконечно глубокой потенциальной ямы как для электронов, так и для дырок. В этой модели существенно завышены не только энергии одночастичных состояний, но и оптическая щель кристаллитов. Анализ электронных состояний в НК, внедренных в различные диэлектрические матрицы, требует вычислений в модели с конечными разрывами зон на гетерогранице.

4.2. Электронные и дырочные состояния в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы

Рассмотрим сферическую КТ GaN радиуса R , внедренную в матрицу широкозонного диэлектрика. Пользуясь теми же соображениями, что и в Главе 2, положим диэлектрическое окружение НК аморфным, а истинную потенциальную энергию для электронов (дырок) определим как сферически симметричную обусловленную только разрывами зон ΔE_c (ΔE_v) на границе полупроводника и диэлектрика:

$$U_{CB(VB)}(\mathbf{r}) \equiv U_{CB(VB)}(r) = \Delta E_{c(v)} \mathcal{G}(r - R), \quad (4.1)$$

где r – расстояние до центра НК. Функция (4.1) обобщает (2.1) для валентной зоны. Как c-GaN, так и w-GaN являются прямозонными широкозонными полупроводниками с экстремумами зон

в точке Γ зоны Бриллюэна, так что для определения квантовых состояний в НК обоих структурных типов в обеих энергетических зонах будем решать единственные уравнения типа (1.44) с однозонными $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтонианами.

Подобно другим полупроводникам с кубической решеткой (арсенид галлия, селенид кадмия), дно зоны проводимости c -GaN характеризуется симметрией Γ_1 , а потолок валентной зоны – симметрией Γ_{15} [115]. Закон дисперсии электронов проводимости вблизи дна зоны является изотропным квадратичным с эффективной массой $m_c = 0.193m_0$ [115], так что при расчете квантовых состояний в зоне проводимости НК c -GaN будем пользоваться $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтонианом:

$$H_{CB}^{(c\text{-GaN})}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_c}. \quad (4.2)$$

Валентная зона в c -GaN в пренебрежении спином и СОВ является трехкратно вырожденной, а электронные состояния вблизи ее потолка могут быть описаны эффективным матричным $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтонианом размерности 3×3 , который иногда называют гамильтонианом Латтинджера-Кона [45]:

$$H_{VB}^{(c\text{-GaN})}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

где L , M и N – параметры валентной зоны. Решения этого гамильтониана являются анизотропными и неквадратичными в отличие от закона дисперсии вблизи дна зоны проводимости. Параметры валентной зоны, согласно [115], составляют $L \approx -5.05$, $M \approx -1.23$, $N \approx -5.86$ (знак «минус» соответствует направлению энергетических ветвей в валентной зоне).

GaN со структурой вюрцита обладает более низкой симметрией, нежели кубический (направление вдоль оси симметрии 6-ого порядка выделено по сравнению с направлениями в плоскости, ей перпендикулярной, далее ось, отвечающую данному выделенному направлению, обозначим как z). Как показано в работе [115], электронные состояния в точке Γ зоны Бриллюэна в структуре вюрцита могут быть формально получены из электронных состояний в структуре сфалерита посредством введения эффективного сжатия вдоль направления $[1\ 1\ 1]$ c -GaN. Это приводит к тому, что зона проводимости становится анизотропной, и характеризуется эффективными массами $m_l \approx 0.19m_0$ и $m_t \approx 0.21m_0$ [115], а $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан имеет вид:

$$H_{CB}^{(w\text{-GaN})}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_t} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l}. \quad (4.4)$$

Заметим, что анизотропия зоны проводимости в w -GaN мала в сравнении с Si и составляет всего $\sim 5\%$.

В валентной зоне посредством действия кристаллического поля частично снимается трехкратное вырождение – она расщепляется на двукратно вырожденную и отщепленную вниз на величину Δ_{CR} невырожденную зоны, а количество параметров, необходимых для записи эффективного гамильтониана возрастает с трех до семи [115]:

$$H_{VB}^{(w-GaN)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} L_2 k_x^2 + M_2 k_y^2 + M_1 k_z^2 & N_2 k_x k_y & N_1 k_x k_z \\ N_2 k_x k_y & M_2 k_x^2 + L_2 k_y^2 + M_1 k_z^2 & N_1 k_y k_z \\ N_1 k_x k_z & N_1 k_y k_z & M_3 k_x^2 + M_3 k_y^2 + L_1 k_z^2 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

В (4.5) в матричном элементе $H_{VB}^{(w-GaN)}_{33}$ для сокращения записи опущено слагаемое $-\Delta_{CR}$, описывающее расщепление потолка валентной зоны кристаллическим полем. Параметры валентной зоны w-GaN приведены в [115]. Расщепление, индуцированное кристаллическим полем в валентной зоне, также по данным [115], составляет $\Delta_{CR} = 0.034$ эВ.

При учете спина и СОВ возникает малое расщепление валентной зоны, которое имеет место как в кубических, так и в гексагональных кристаллах. В кубических кристаллах оно приводит к расщеплению шестикратно (с учетом спина) вырожденной валентной зоны на четырехкратно вырожденную зону легких и тяжелых дырок и двукратно вырожденную отщепленную зону. Отщепленная зона находится ниже по энергии на величину Δ_0 . В гексагональных кристаллах валентная зона при учете СОВ представляет собой совокупность трех двукратно вырожденных энергетических ветвей (так называемые А-, В- и С-дырочные зоны в порядке уменьшения энергии). По данным [116] спин-орбитальное расщепление валентной зоны составляет в w-GaN 17 мэВ. В c-GaN спин-орбитальное расщепление валентной зоны было рассчитано в [117] с применением метода линейаризованных присоединенных плоских волн в приближении локальной плотности для обменно-корреляционного функционала. Полученное значение составило $\Delta_0 = 18.5$ мэВ.

Заметим, что энергии размерного квантования в НК составляют, как правило, существенно большие значения, чем величины Δ_{CR} и Δ_0 [24]. Кроме того, электронные свойства НК представляют интерес при комнатной T , когда размытие энергий квантовых состояний составляет величину $k_B T \approx 0.025$ эВ, что сопоставимо с величинами Δ_{CR} и Δ_0 , так что при анализе квантовых состояний в валентной зоне пренебрежем этими расщеплениями. В результате хорошим приближением для $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана вблизи потолка валентной зоны c-GaN является матрица (4.3), а для w-GaN – (4.5), в которой $\Delta_{CR} \rightarrow 0$.

Для решения уравнения (1.44) с $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтонианами (4.2)–(4.5) и со сферически симметричной потенциальной энергией (4.1) воспользуемся тем же методом из работы [77], что был успешно применен в Главе 2 для анализа спиновых свойств НК Si: разобьем эффективный

гамильтониан на сферически симметричный гамильтониан нулевого приближения $\hat{H}_{0CB(VB)}(r)$, вносящий основной вклад в энергию квантового состояния, и $\hat{H}_{1CB(VB)}(\mathbf{r})$, определяемый анизотропией энергетических зон вблизи их экстремумов, являющийся возмущением. Для определения $\hat{H}_{0CB(VB)}(r)$ каждый $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониан (4.2)–(4.5) усредним по направлениям в \mathbf{k} -пространстве и учтем сферически симметричный потенциал (4.1):

$$\hat{H}_{0CB(VB)}(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{aver}} \Delta + U_{CB(VB)}(r) \right) \hat{L}_0, \quad (4.6)$$

где Δ – оператор Лапласа, \hat{L}_0 имеет тот же смысл, что при первом определении в Главе 2: квадратная единичная матрица размерности неприводимого представления, по которому преобразуются блоховские функции вблизи экстремума соответствующей зоны (скаляр в случае зоны проводимости, матрица 3×3 в случае валентной зоны), а m_{aver} равна:

1) $m_c = 0.193m_0$ в зоне проводимости c-GaN (в этом случае усредненный гамильтониан совпадает с исходным);

2) $\frac{3m_l m_l}{2m_l + m_l} \approx 0.2m_0$ в зоне проводимости w-GaN;

3) $\frac{3}{2M + L} \approx 0.66m_0$ в валентной зоне c-GaN. Параметры L и M определены в (4.3);

4) $\frac{9}{2M_1 + 2M_2 + 2L_2 + 2M_3 + L_1} \approx 0.54m_0$ в валентной зоне w-GaN. Параметры L_1, L_2, M_1, M_2

и M_3 определены в (4.5).

Гамильтониан $\hat{H}_{1CB(VB)}$ определяется как разность исходного гамильтониана и $\hat{H}_{0CB(VB)}$. В качестве базисных волновых функций будем использовать решение уравнения Шредингера с гамильтонианом $\hat{H}_{0CB(VB)}$ частицы в сферической потенциальной яме конечной глубины. Результат расчета энергий и волновых функций нулевого приближения определяется величинами разрывов зон на границе GaN и диэлектрика, значения которых для контактов c-GaN с диэлектриками [118] приведены в Таблице 1. Все гетеропереходы «c-GaN / диэлектрик» согласно [118] являются переходами I типа.

В отличие от границ вида «c-GaN / диэлектрик» в литературе нет систематической информации о разрывах зон на интерфейсах «w-GaN / диэлектрик». Строго говоря, разрывы зон на границе одного и того же диэлектрика с w-GaN и c-GaN должны быть разными. Но, поскольку запрещенные зоны в обеих фазах GaN близки по величине (согласно [119], величина запрещенной зоны в w-GaN больше всего на 0.19 эВ – 3.39 против 3.2 эВ в c-GaN), можно

считать это отличие малым в сравнении с величинами разрывов. В качестве первого приближения положим, что разрывы как зоны проводимости, так и валентной зоны на интерфейсах «w-GaN / диэлектрик» на 0.1 эВ меньше соответствующих значений на интерфейсах «с-GaN / диэлектрик». Их значения приведены в Таблице 2.

Таблица 1 – расчетные значения [118] разрывов зоны проводимости и валентной зоны на планарном интерфейсе «с-GaN / диэлектрик» для различных диэлектрических матриц при комнатной T . E_g означает ширину запрещенной зоны соответствующего диэлектрика по данным [118].

Диэлектрик	E_g , эВ	ΔE_c , эВ	ΔE_v , эВ	Тип гетероперехода
SiO ₂	9.0	2.6	3.2	I
Al ₂ O ₃	8.8	2.2	3.4	I
HfO ₂	6.0	1.1	1.6	I
Si ₃ N ₄	5.3	1.3	0.8	I

Таблица 2 – оценки ΔE_c и ΔE_v на планарном интерфейсе «w-GaN / диэлектрик» для различных диэлектриков при комнатной T .

Диэлектрик	ΔE_c , эВ	ΔE_v , эВ
SiO ₂	2.5	3.1
Al ₂ O ₃	2.1	3.3
HfO ₂	1.0	1.7
Si ₃ N ₄	1.4	0.7

В силу того, что в сферической потенциальной яме конечной глубины дискретные уровни могут и не существовать [83], необходимо определить «критический» R , при котором уровни нулевого приближения переходят из дискретного спектра в непрерывный. «Критический» R будет определяться высотой барьера, а также эффективной массой носителей, при этом, чем масса меньше, тем больше будет энергия частицы и тем больше оказывается R , при котором в КТ уже не могут существовать связанные состояния. Рассчитанные значения критического R как функции высоты барьера в случае наименьшей эффективной массы – для электронов в с-GaN – приведены на Рисунке 6.

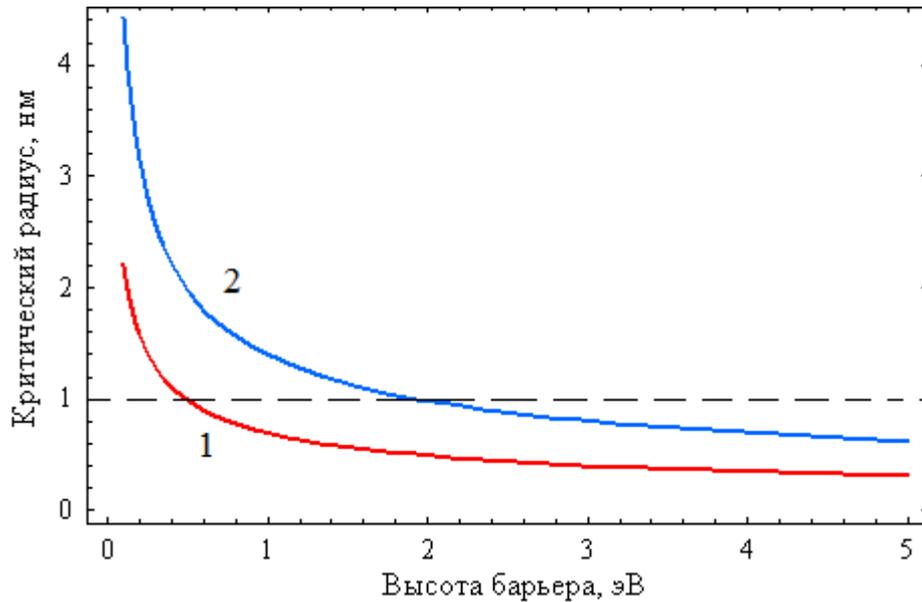


Рисунок 6 – зависимость R от высоты барьера в НК c -GaN, в котором еще существует $1s$ электронный уровень (кривая 1), $1p$ электронный уровень (кривая 2). Горизонтальная пунктирная прямая отвечает $R = 1$ нм.

Как видно из Рисунка 6, для барьеров с высотой более 0.6 эВ уровень основного состояния электрона существует в НК c -GaN с R менее 1 нм, т.е. во всем диапазоне значений размеров, для которых в принципе применимо приближение огибающей (см. [85] и обсуждение в Главе 2). Величины разрывов зон на границе «GaN/ диэлектрик» составляют для всех рассматриваемых систем более 0.6 эВ (см. Таблицы 1 и 2), так что по крайней мере один электронный и один дырочный уровень будут во всех рассматриваемых НК в диапазоне R от 1 нм и выше.

С помощью предложенного алгоритма нами рассчитаны уровни энергии электронов и дырок в НК c -GaN и w -GaN в зависимости от R , внедренных во все диэлектрики, перечисленные в Таблице 1. Ввиду того, что в зоне проводимости c -GaN закон дисперсии носителей принимается квадратичным и изотропным, уровни фактически определяются гамильтонианом \hat{H}_{0CB} с соответствующей эффективной массой. В качестве примера на Рисунке 7 приведены энергии $1s$ и $1p$ электронных уровней в кристаллитах c -GaN, помещенных в матрицу Si_3N_4 , как функции R .

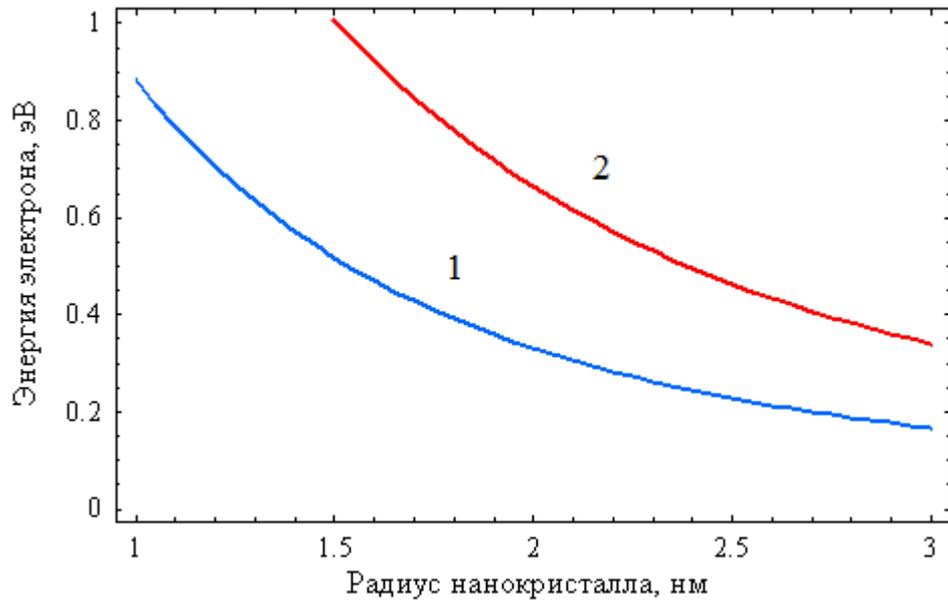


Рисунок 7 – энергии электронных $1s$ (кривая 1) и $1p$ уровней (кривая 2) в НК $c\text{-GaN}$, помещенном в Si_3N_4 , в зависимости от R .

Дырочные состояния в НК $c\text{-GaN}$ модифицируются принципиальным образом за счет сложной структуры валентной зоны, определяемой гамильтонианом \hat{H}_{1VB} : если $1s$ состояние практически не изменяется, то $1p$ состояние расщепляется из-за анизотропии валентной зоны [77]. Часть уровней отщепляется достаточно высоко (выше 1.5 эВ), где использованное приближение для $k\cdot p$ -гамильтониана может нарушаться, так что их учитывать не будем. Нижний же уровень из группы $1p$ состояний опускается на величину, которая по результатам наших расчетов может быть представлена как $0.21/R^2$ эВ, где R измеряется в нм. На Рисунке 8 приведена зависимость энергии нижних дырочных уровней в НК $c\text{-GaN}$, погруженном в HfO_2 , в зависимости от R .

В случае НК $w\text{-GaN}$ энергия, отвечающая основному электронному $1s$ состоянию, оказывается практически такой же, как и в кристаллитах кубической фазы в силу того, что разница между усредненными эффективными массами в зонах проводимости $c\text{-GaN}$ и $w\text{-GaN}$ очень мала (менее 1%). Однако анизотропия зоны проводимости приводит к расщеплению вырожденного $1p$ состояния, которое по нашим расчетам составляет $0.09/R^2$ эВ, где R измеряется в нм. При этом ниже оказывается уровень, отвечающий поперечным по отношению к оси z $1p$ функциям, в силу того, что в зоне проводимости $w\text{-GaN}$ $m_t > m_l$. На Рисунке 9 приведены зависимости энергии основного $1s$ состояния и расщепленного $1p$ состояния для НК $w\text{-GaN}$ в матрице SiO_2 .

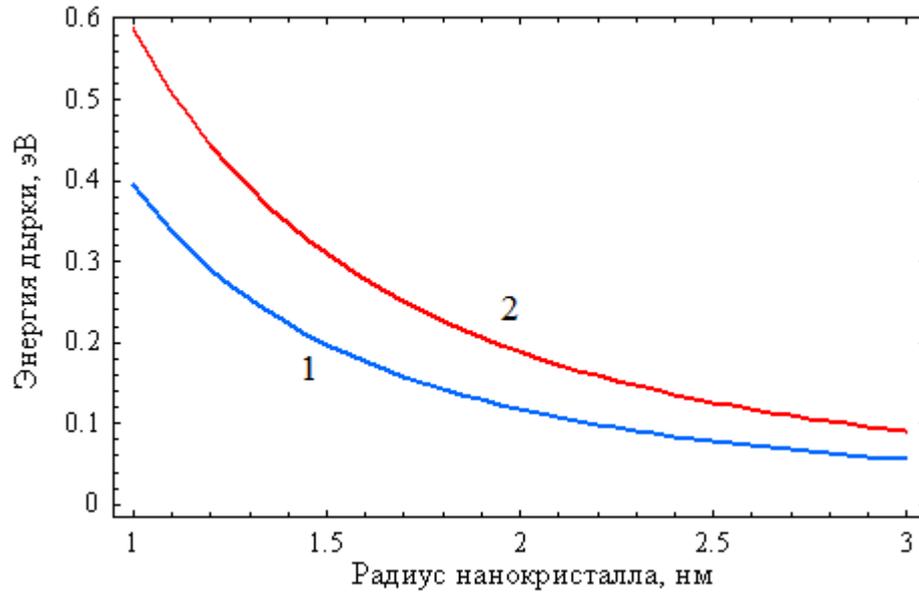


Рисунок 8 – энергии дырочных $1s$ (кривая 1) и нижнего $1p$ уровней (кривая 2) в НК $c\text{-GaN}$, помещенном в матрицу HfO_2 , в зависимости от R .

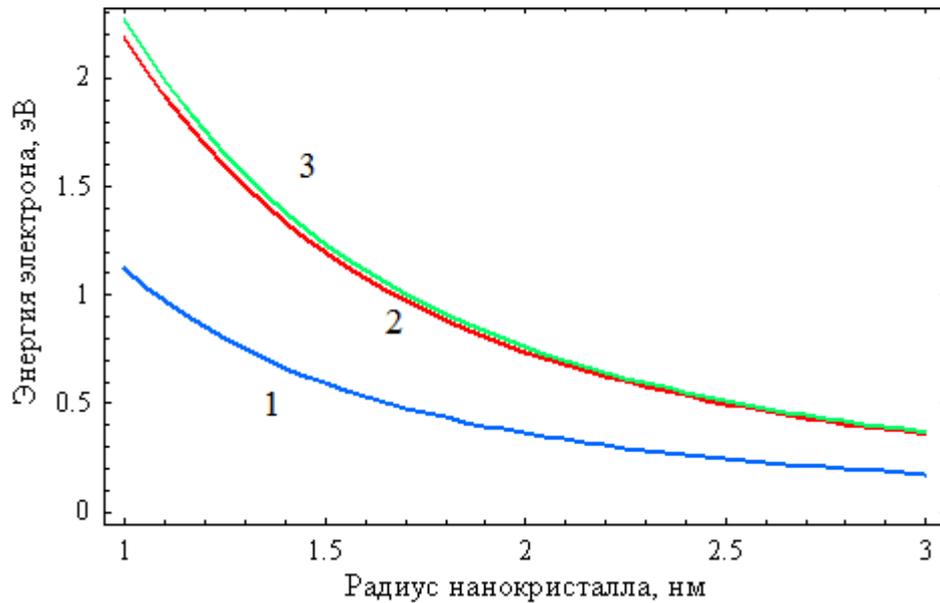


Рисунок 9 – энергии электронных $1s$ (кривая 1) и $1p$ уровней (кривые 2 и 3) в НК $w\text{-GaN}$, помещенном в матрицу SiO_2 , в зависимости от R .

Как видно из Рисунка 9, расщепление электронного $1p$ уровня, связанное с понижением кристаллической симметрии, является величиной достаточно малой, так что в НК с $R > 2$ нм им можно пренебречь. Это, очевидно, связано с тем, что анизотропия зоны проводимости в $w\text{-GaN}$ составляет всего $\sim 5\%$. Так что даже в НК $w\text{-GaN}$ можно полагать закон дисперсии в зоне проводимости изотропным и квадратичным с эффективной массой $m_c \approx 0.2m_0$.

Наконец, дырочные спектры в НК $w\text{-GaN}$ имеют наиболее сложную структуру,

определяемую как анизотропией валентной зоны, характерной и для НК c-GaN, так и расщеплением, индуцированным понижением кристаллической симметрии с кубической до гексагональной. Однако и в валентной зоне такое расщепление оказывается малым, так что для кристаллитов с размерами $R > 2$ нм им можно пренебречь.

С точки зрения исследования оптических свойств полупроводниковых НК, помещенных в диэлектрические матрицы, наибольший интерес представляют энергии E_e и E_h основных электронного и дырочного уровней соответственно, между которыми происходит радиационный переход при поглощении или испускании фотона. В Таблице 3 представлены результаты расчета энергий основного электронного и дырочного состояний в НК GaN как кубической, так и гексагональной фаз, помещенных в диэлектрические матрицы SiO_2 , Al_2O_3 , HfO_2 и Si_3N_4 , для двух значений $R = 1.5$ и 2.5 нм. Как видно, E_e в НК одинаковых размеров, внедренных в одни и те же матрицы, но обладающих различной кристаллической структурой (сфалерит и вюрцит) очень близки (разница составляет $\sim 2\%$), что определяется близостью значений эффективной массы в зоне проводимости c-GaN и w-GaN. В то же время соответствующие E_h отличаются заметно сильнее (разница составляет до 25%), причем в НК с гексагональной структурой E_h выше. В целом, E_e заметно выше, чем E_h , что главным образом определяется соотношением между усредненными по направлениям эффективными массами электронов и дырок: первые оказываются практически в 3 раза меньше.

Таблица 3 – E_e и E_h в НК c-GaN и w-GaN с $R = 1.5$ и 2.5 нм, внедренных в четыре диэлектрические матрицы (SiO_2 , Al_2O_3 , HfO_2 и Si_3N_4).

E, эВ	E_e , эВ				E_h , эВ			
	1.5	2.5	1.5	2.5	1.5	2.5	1.5	2.5
R , нм	c-GaN		w-GaN		c-GaN		w-GaN	
SiO_2	0.606	0.251	0.593	0.244	0.211	0.082	0.256	0.099
Al_2O_3	0.587	0.247	0.575	0.240	0.213	0.082	0.257	0.100
HfO_2	0.491	0.222	0.492	0.219	0.196	0.078	0.237	0.095
Si_3N_4	0.517	0.229	0.514	0.225	0.175	0.073	0.212	0.089

В заключение раздела добавим, что посредством решения уравнения (1.44) для определения основного электронного и дырочного состояний в НК c-GaN и w-GaN были также вычислены соответствующие им огибающие: скалярная $f_e(\mathbf{r})$ для электронного состояния и векторная $f_h(\mathbf{r})$ – для дырочного.

4.3. Оптическая щель нанокристаллов нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы

Энергия фотонов E_{ph} , излучаемых при межзонной электронно-дырочной рекомбинации в НК, в зависимости от R (оптическая щель НК) в нулевом приближении может быть рассчитана как

$$E_{ph}(R) = E_e(R) + E_h(R) + E_g, \quad (4.7)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны объемного GaN. На Рисунках 10 и 11 приведены результаты расчетов оптической щели НК c-GaN и w-GaN соответственно, внедренных в диэлектрические матрицы SiO_2 , Al_2O_3 , HfO_2 и Si_3N_4 . Как можно видеть, при уменьшении R от 3 до 1 нм оптическая щель НК c-GaN возрастает от 3.4 до 4.8 эВ, а НК w-GaN – от 3.6 до 5.0 эВ. Следует заметить, что ширина запрещенной зоны объемного c-GaN меньше ширины запрещенной зоны объемного w-GaN на 0.19 эВ, другими словами, основное отличие в величине оптической щели между НК разных фаз, внедренных в один и тот же диэлектрик, определяется разницей в ширинах запрещенных зон кристаллических фаз GaN. Это связано главным образом с тем, что близки как величины разрывов зон на границах «c-GaN / диэлектрик» и «w-GaN / диэлектрик» и (см. Таблицы 1 и 2), так и усредненные по направлениям в \mathbf{k} -пространстве эффективные массы носителей. Во всех случаях уменьшение оптической щели с увеличением R соответствует поведению, типичному для систем с размерным квантованием [66].

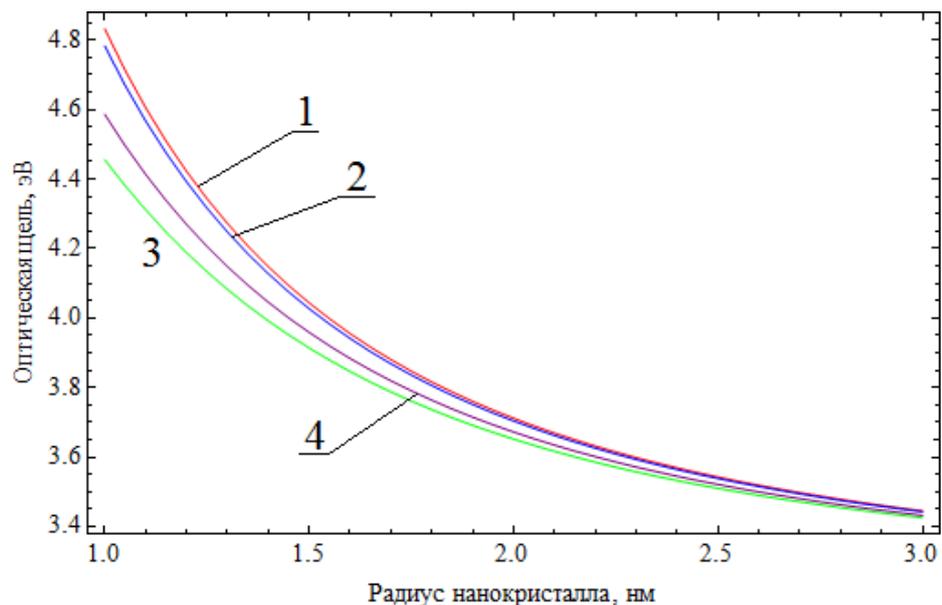


Рисунок 10 – оптическая щель НК c-GaN, помещенных в матрицы SiO_2 (1), Al_2O_3 (2), HfO_2 (3), Si_3N_4 (4), как функция R .

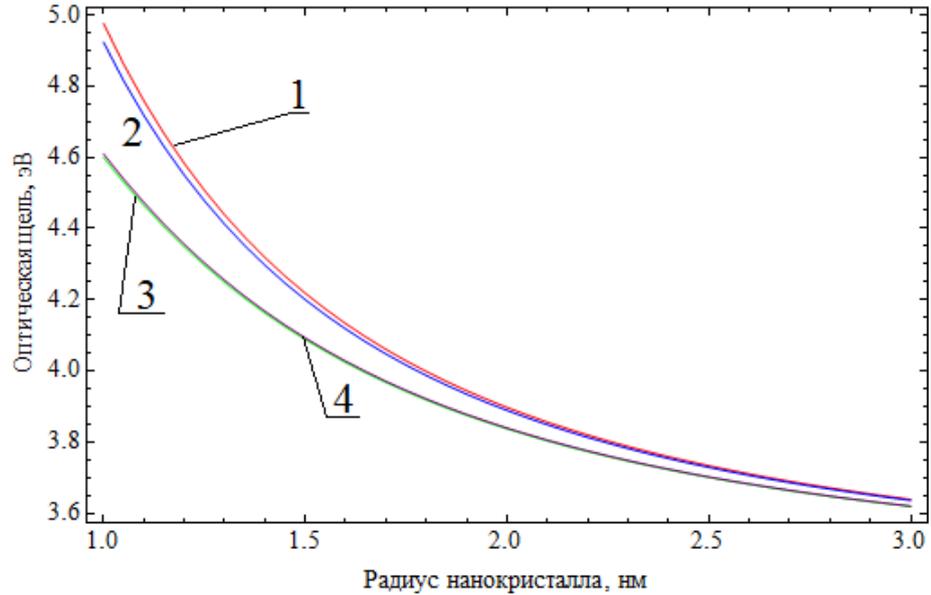


Рисунок 11 – оптическая щель НК w-GaN, помещенных в матрицы SiO₂ (1), Al₂O₃ (2), HfO₂ (3), Si₃N₄ (4), как функция R .

Если изменение R существенным образом сказывается на значении оптической щели, то ее зависимость от диэлектрического окружения, в которую внедрен НК, оказывается слабой. Разница в величинах оптической щели НК в матрицах SiO₂ и Al₂O₃ не превышает 1 %, как и различие в значениях этих величин в случае внедрения кристаллитов в матрицы HfO₂ и Si₃N₄. Это поведение связано с близостью разрывов зон на границах соответствующих диэлектриков и GaN (см. Таблицы 1 и 2). Разница в величинах оптической щели НК во всех рассматриваемых матрицах не превышает 10 % при $R = 1$ нм и 1 % при $R = 3$ нм. Слабая зависимость от типа матрицы связана с тем, что энергетические барьеры для носителей на поверхности НК оказываются достаточно высокими, и при увеличении R уровни основного состояния электрона и дырки опускаются ниже по энергии, волновые функции сильнее локализируются внутри НК, в результате потенциальные ямы для носителей во всех случаях становятся эффективно бесконечно глубокими. При $R = 3$ нм энергия основного электронно-дырочного перехода независимо от типа диэлектрического окружения составляет ≈ 3.4 эВ в НК c-GaN и ≈ 3.6 эВ в НК w-GaN; это и в том, и в другом случае на ≈ 0.2 эВ больше ширины запрещенной зоны в массивном образце. В результате можно утверждать, что при комнатной T ($k_B T \approx 0.025$ эВ) наличие смещения энергии фундаментального излучательного перехода в НК по сравнению с объемным GaN даже при $R = 3$ нм может быть установлено методами спектроскопии люминесценции в УФ диапазоне спектра.

Длина волны λ_{ph} излучения фотона при основном межзонном электронно-дырочном

переходе в уединенном НК как функция его радиуса R может быть рассчитана по формуле:

$$\lambda_{ph}(R) = \frac{2\pi \hbar c}{E_{ph}(R)}. \quad (4.8)$$

Результаты расчета (4.8) для НК c-GaN и w-GaN в различных диэлектрических матрицах представлены на Рисунках 12 и 13, соответственно. Из них видно, что спектры излучения всех НК лежат в ближней ультрафиолетовой (УФ) спектральной области, а именно, в диапазоне от ~ 260 до ~ 360 нм для c-GaN и от ~ 250 до ~ 340 нм для w-GaN.

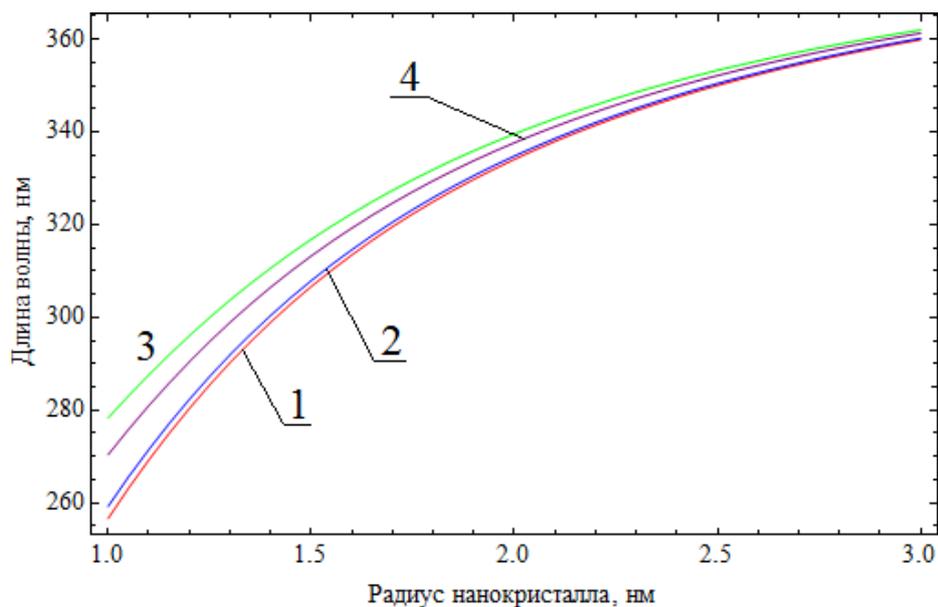


Рисунок 12 – длина волны фотона, излучаемого при основном электронно-дырочном переходе в НК c-GaN, внедренных в матрицы SiO₂ (1), Al₂O₃ (2), HfO₂ (3), Si₃N₄ (4), в зависимости от R .

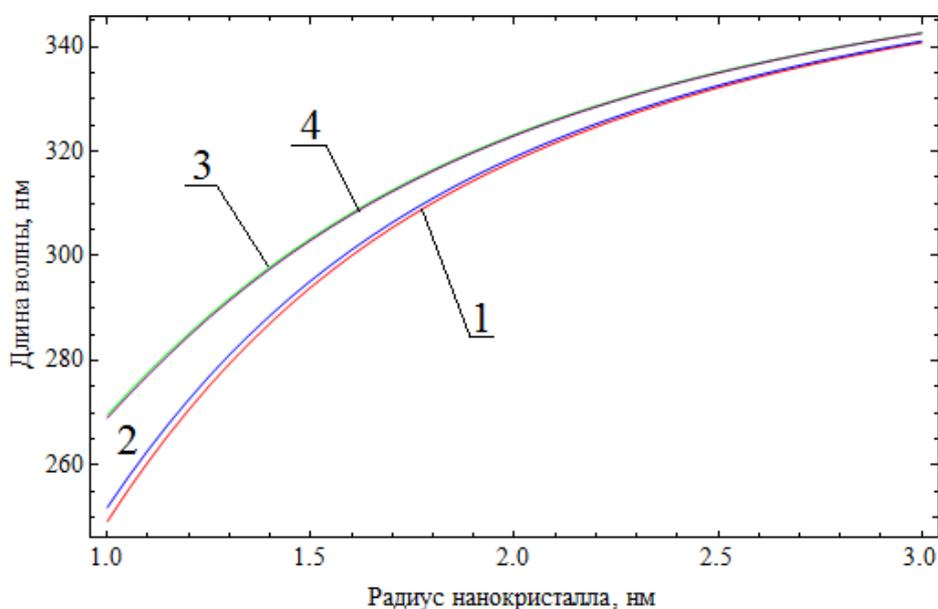


Рисунок 13 – длина волны фотона, излучаемого при основном электронно-дырочном переходе в НК w-GaN, внедренных в матрицы SiO₂ (1), Al₂O₃ (2), HfO₂ (3), Si₃N₄ (4), в зависимости от R .

4.4. Излучательная рекомбинация в нанокристаллах нитрида галлия, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы

Если оптическая щель НК определяет спектральный диапазон, в котором следует детектировать их межзонное излучение, то интенсивность фотонной эмиссии зависит от другой важной характеристики – вероятности τ_r^{-1} излучательной рекомбинации в единицу времени при переходе из основного состояния в зоне проводимости в основное состояние валентной зоны НК (вероятность электронно-дырочной рекомбинации в единицу времени). В приближении изотропного излучения эта величина может быть рассчитана по формуле [36]

$$\tau_r^{-1} = \frac{4e_0^2 |\mathbf{r}_{cv}|^2 \omega_{cv}^3 n_d^3(\omega_{cv})}{3\hbar c^3 (n_{NC}^2(\omega_{cv}) + 2n_d^2(\omega_{cv}))}, \quad (4.9)$$

где

$$\omega_{cv} = E_{ph}(R)/\hbar \quad (4.10)$$

– частота излучательного перехода, являющаяся функцией R , $n_d(\omega)$ и $n_{NC}(\omega)$ – показатели преломления на частоте ω диэлектрической матрицы и НК соответственно, а

$$\mathbf{r}_{cv} = \mathbf{e}_x x_{cv} + \mathbf{e}_y y_{cv} + \mathbf{e}_z z_{cv}, \quad (4.11)$$

где x_{cv} , y_{cv} и z_{cv} – соответственно матричные элементы операторов координат x , y и z между основным состоянием электрона и дырки в НК.

Показатели преломления $n_d(\omega_{cv})$ рассматриваемых матриц в ближнем УФ спектральном диапазоне [120] приведены в Таблице 4. Показатель преломления НК GaN обеих фаз с $R > 1$ нм полагается равным показателю преломления объемного материала, поскольку увеличение оптической щели НК в сравнении с объемным GaN в рассматриваемом диапазоне размеров составляет не более 50 %, и этим изменением в выражении (4.9) согласно [36] можно пренебречь. В Таблице 4 приведены также значения показателей преломления c-GaN [119] и w-GaN в ближнем УФ диапазоне спектра. В силу анизотропии для w-GaN используется усредненное по направлениям значение показателя преломления, полученное на основе данных [121] и [122].

Матричные элементы операторов координат x_{cv} , y_{cv} и z_{cv} рассчитаны с помощью матричных элементов операторов проекций импульса [40]:

$$x_{cv}^{(\alpha)} = -\frac{ip_{cv}^{(\alpha)}}{m_0 \omega_{cv}}, \quad (4.12)$$

где $x^{(\alpha)} = x, y, z$ при $\alpha = 1, 2, 3$ соответственно, i – мнимая единица. Далее, используя представление (1.63) волновой функции через огибающую и блоховские функции в

неограниченном кристалле, учитывая, что на масштабах КТ компоненты огибающей меняются медленно (см., например, [66, 77]), а блоховские функции быстро осциллируют (с пространственным периодом, равным параметру решетки), можно переписать матричный элемент (4.12) в виде [40]:

$$x_{cv}^{(\alpha)} = -\frac{i P_{cv}^{(\alpha)}}{m_0 \omega_{cv}} \cdot \int_{\infty} d\mathbf{r} f_e^*(\mathbf{r}) f_h^{(\alpha)}(\mathbf{r}), \quad (4.13)$$

где $P_{cv}^{(\alpha)}$ – межзонный матричный элемент оператора проекции импульса в объемном материале, $\alpha = 1, 2, 3$ и соответствуют проекциям x, y, z , а интегрирование огибающих производится в неограниченных пределах в 3D пространстве в соответствии с (1.65). Учет анизотропии матричного элемента оператора проекции импульса необходим в w-GaN, в то время как в c-GaN блоховские функции потолка валентной зоны могут быть симметризованы так, что все матричные элементы $P_{cv}^{(\alpha)}$ будут одинаковы. Подставляя (4.11)–(4.13) в (4.9), а также используя связь (4.10) частоты излучения с оптической щелью, получаем формулу для расчета вероятности излучательной рекомбинации в единицу времени при межзонном переходе в НК GaN в рамках приближения огибающей функции:

$$\tau_r^{-1}(R) = \frac{4e_0^2 E_{ph}(R) n_d^3(\omega_{cv})}{3\hbar^2 m_0^2 c^3 (n_{NC}^2(\omega_{cv}) + 2n_d^2(\omega_{cv}))} \cdot \sum_{\alpha=1}^3 |P_{cv}^{(\alpha)}|^2 \left| \int_{\infty} d\mathbf{r} f_e^*(\mathbf{r}) f_h^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \right|^2. \quad (4.14)$$

Таблица 4 – показатели преломления кристаллических фаз GaN и рассматриваемых в Главе 4 диэлектрических матриц в ближнем УФ спектральном диапазоне.

Материал	Показатель преломления в ближнем УФ спектральном диапазоне
c-GaN	2.3
w-GaN	2.35
SiO ₂	1.49
Al ₂ O ₃	1.69
HfO ₂	2.25
Si ₃ N ₄	2.06

Используя известные значения $P_{cv}^{(\alpha)}$ для GaN [115], получим зависимость характерного времени излучательной рекомбинации τ_r от R для НК c-GaN (Рисунок 14) и w-GaN (Рисунок 15) в различных диэлектрических матрицах.

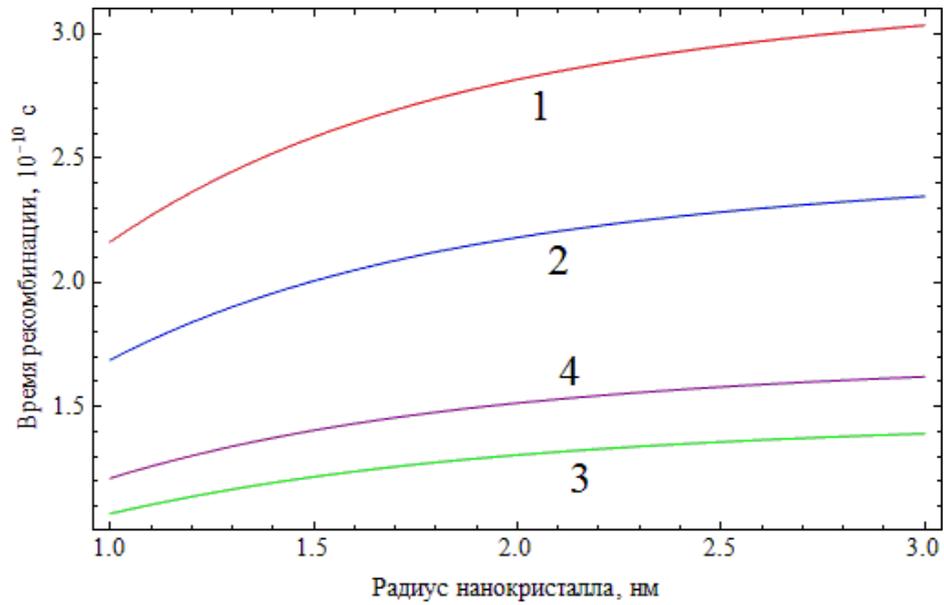


Рисунок 14 – τ_r в НК c-GaN, помещенных в матрицы SiO₂ (1), Al₂O₃ (2), HfO₂ (3), Si₃N₄ (4), как функция R .

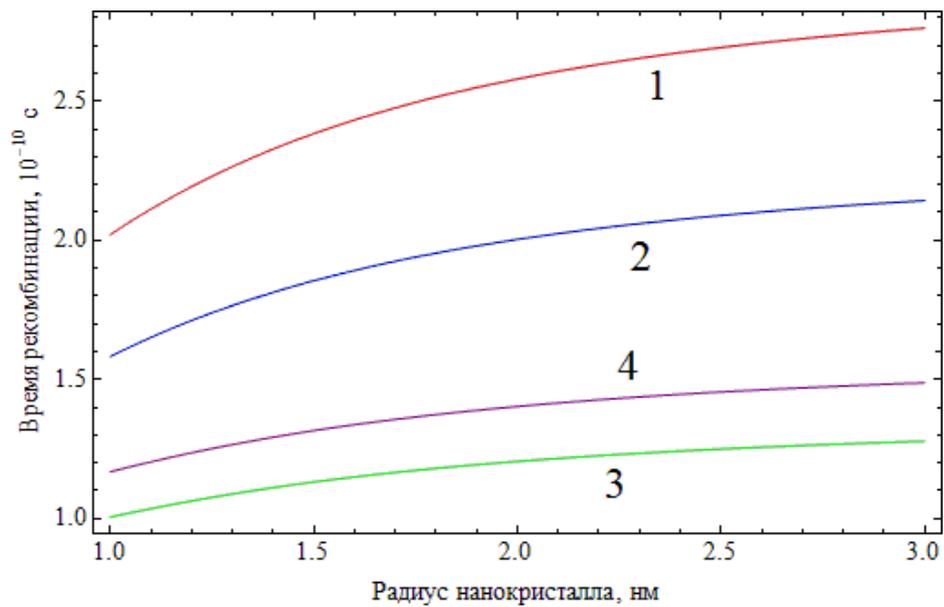


Рисунок 15 – τ_r в НК w-GaN, помещенных в матрицы SiO₂ (1), Al₂O₃ (2), HfO₂ (3), Si₃N₄ (4), как функция R .

Можно видеть, что времена τ_r в НК c-GaN с $R = 1 \div 3$ нм находятся в диапазоне значений $(1.1 \div 3.0) \cdot 10^{-10}$ с (Рисунок 14), а в НК w-GaN с теми же R – в диапазоне значений $(1.0 \div 2.8) \cdot 10^{-10}$ с (Рисунок 15). В отличие от ширины оптической щели, τ_r существенно зависит от диэлектрического окружения КТ, наибольшее значение имеет в случае SiO₂, а наименьшее – в случае HfO₂. При R , близких к 3 нм, τ_r в кристаллитах в HfO₂ оказывается более чем в 2 раза ниже, чем в НК, внедренных в SiO₂. Кроме того, сравнительно малые τ_r

характерны для НК GaN, встроенных в матрицу Si₃N₄: разница с аналогичной характеристикой для НК в матрице HfO₂ составляет менее 20 %. Зависимость от типа окружающего диэлектрика имеет место для НК обеих фаз. Таким образом, с точки зрения вероятности излучения наиболее перспективными из рассмотренных являются системы НК GaN, встроенных в HfO₂ и Si₃N₄.

С ростом R время τ_r монотонно возрастает во всех рассмотренных системах, и в диапазоне от 1 до 3 нм увеличение составляет ~ 40 %. Такая зависимость от R характерна для НК обеих фаз. Однако, τ_r в НК c-GaN и w-GaN, встроенных в одну и ту же матрицу, несколько отличаются: в w-GaN τ_r меньше примерно на 10 %.

Заметим также, что в реальных приборных структурах интенсивность люминесценции будет определяться не только τ_r^{-1} , но и вероятностями конкурирующих безызлучательных процессов, таких как Оже-процесс и захват носителей на оборванные связи на поверхности кристаллита или центры безызлучательной рекомбинации внутри него. Первый процесс в НК на основе прямозонных полупроводников является очень быстрым [123], однако реализуется только в случае высокой интенсивности оптической или электрической накачки системы (нужно, чтобы в НК помимо одной электронно-дырочной пары был еще хотя бы один носитель), так что может быть легко подавлен посредством управления уровнем возбуждения. Вероятность же захвата носителей на дефекты варьируется в очень широких пределах [36]; она может быть как выше, так и ниже вероятности излучательной рекомбинации. Подавление этого канала безызлучательной рекомбинации в принципе может быть осуществлено посредством постимплантационного отжига дефектов [124]. Кроме того, концентрация оборванных связей на поверхности НК при прочих равных условиях должна быть ниже в матрицах, содержащих те же химические элементы, из которых состоит и сам кристаллит [125]. Таким диэлектриком является Si₃N₄: наличие в нем N повышает вероятность формирования кристаллитов GaN с пассивированными дефектами и, соответственно, меньшим количеством центров безызлучательной рекомбинации. В результате, с точки зрения реализации излучения внедренных в диэлектрические матрицы НК GaN наибольший практический интерес представляют 2 диэлектрика: HfO₂ и Si₃N₄.

4.5. Заключительные замечания по Главе 4

Выполним оценки точности проведенных вычислений. Во-первых, заметим, что в силу слабой анизотропии зоны проводимости как в кубической, так и в гексагональной кристаллической фазах GaN точность рассчитанных энергий электронных уровней ограничена фактически точностью приближения огибающей функции в приложении к анализу квантовых

состояний в КТ. Точность применения приближения огибающей для НК обсуждалась в Главе 2. Здесь укажем только, что диапазон R , для которых применима предложенная теория, составляет от 1 до 5 нм.

Однако, ввиду сильной анизотропии валентной зоны, погрешность при расчете $1p$ дырочных состояний составляет $\sim 30\%$ [126]. Тем не менее, поскольку анизотропные вклады в эффективный гамильтониан валентной зоны не приводят к смешиванию состояний с соседними орбитальными моментами, основной $1s$ уровень рассчитан с гораздо более высокой точностью – погрешность составляет $\sim 10\%$ и обусловлена она, согласно [77], смешиванию $1s$ и $1d$ состояний. Теперь заметим, что дырочные уровни по абсолютной величине в 2–3 раза меньше электронных. Это фактически означает, что оптическая щель, рассчитанная на основе представления о невзаимодействующих электроне и дырке, заметно меньше будет чувствительна к изменению дырочного уровня. Поскольку электронные уровни рассчитаны с высокой точностью, то погрешность $\sim 10\%$ в определении основного состояния дырки вносит погрешность не более 5% в определение оптической щели.

В ходе вычислений мы не приняли во внимание различные электростатические взаимодействия: прямое кулоновское взаимодействие электрона и дырки, а также их взаимодействие с полями собственных электростатических изображений и с полями изображений друг друга. Как показано автором диссертационного исследования в [86], в НК, внедренных в широкозонные диэлектрические матрицы, взаимодействия носителей с полями собственных изображений и с полями изображений носителей противоположного сорта компенсируют друг друга. В результате во внимание необходимо принимать только прямое кулоновское взаимодействие электрона и дырки, экранированное системой валентных электронов НК. Опять же, пользуясь оценками, приведенными в [86], погрешность от учета электронно-дырочного притяжения составляет не более 10%. Таким образом, принимая во внимание все выше перечисленные источники погрешности вычисления оптической щели кристаллитов GaN, можно оценить погрешность расчета этой величины в 10–15%.

Наконец, рассчитанные значения оптической щели интересно сравнить с работой [14], где был обнаружен голубой сдвиг длины волны излучаемого при межзонном переходе фотона. Сопоставляя обнаруженное там смещение ≈ 0.22 эВ, заключаем, что средний R НК, участвовавших в излучении, составлял ~ 2.5 –3 нм.

4.6. Выводы по Главе 4

1. Поскольку усредненные по направлениям эффективные массы в зоне проводимости в кубической и гексагональной фазах GaN отличаются менее чем на 5%, а также близки по

величине разрывы зоны проводимости на границе GaN обеих фаз с диэлектриком, то энергии электронов в НК обеих фаз близки по абсолютной величине.

2. В отличие от состояний в зоне проводимости, энергии дырочных уровней в НК кубического и гексагонального нитрида галлия заметно отличаются за счет разницы в параметрах валентной зоны двух фаз. Различие составляет до 25 %.

3. Понижение симметрии в НК GaN гексагональной фазы в сравнении с кубической вносит лишь малые изменения в положения уровней: расщепления, связанные с понижением симметрии, малы по сравнению с характерными энергиями размерного квантования.

4. Показано, что с увеличением R в интервале 1–3 нм длина волны межзонного излучения НК обеих фаз увеличивается от 250 до 360 нм, оставаясь в УФ диапазоне спектра.

5. Расчеты времен излучательной рекомбинации τ_r для того же интервала R показали, что они слабо зависят от типа кристаллической модификации GaN (с- и w-фазы); эти времена растут от $1.1 \cdot 10^{-10}$ до $3.0 \cdot 10^{-10}$ с для с-GaN и $1.0 \cdot 10^{-10}$ до $2.8 \cdot 10^{-10}$ с для w-GaN. С изменением типа матрицы величина τ_r^{-1} для обеих фаз возрастает в следующей последовательности: $\tau_r^{-1}(\text{SiO}_2) < \tau_r^{-1}(\text{Al}_2\text{O}_3) < \tau_r^{-1}(\text{Si}_3\text{N}_4) < \tau_r^{-1}(\text{HfO}_2)$.

6. С точки зрения оптических приложений наиболее перспективными Si-совместимыми диэлектриками для ионно-лучевого внедрения НК GaN являются Si_3N_4 и HfO_2 .

Глава 5. Электронные состояния в магнитно-индуцированных квантовых точках на краю двумерного топологического изолятора

Приближение огибающей функции может быть эффективно применено и к исследованию квантовых состояний в низкоразмерных системах на основе 2D и 3D ТИ. При этом, в зависимости от того объекта, чьи электронные свойства изучаются, в уравнении (1.44) могут быть использованы как $k\cdot p$ -гамильтонианы, описывающие электронные свойства вблизи экстремумов энергетических зон объемного материала [127–130], так и отвечающие поверхностным или краевым состояниям [25–27, 50, 131]. Для расчета электронных состояний в КТ на краю 2D ТИ ранее применялось именно второе приближение [26–27].

В этой главе сначала обоснуем применимость $k\cdot p$ -гамильтониана краевых состояний в квантовой яме (КЯ) HgTe/CdHgTe для дальнейшего использования при расчете электронных состояний в КТ на краю 2D ТИ, затем выполним сам расчет квантовых состояний и, наконец, исследуем некоторые их свойства.

5.1. $k\cdot p$ -гамильтониан на краю двумерного топологического изолятора HgTe/CdHgTe

Нами рассматривается структурно симметричная КЯ HgTe/CdTe, выращенная в кристаллографическом направлении $[0\ 0\ 1]$, в пренебрежении СОВ Дрессельхауза [132], с толщиной, превышающей критическую [127] – необходимую для «инвертации» электронной и дырочной зон размерного квантования в КЯ и, соответственно, формирования на ее краю проводящих спин-поляризованных состояний. Предполагаемая структурная симметрия КЯ позволяет, наряду с СОВ Дрессельхауза, не принимать во внимание и СОВ Рашбы [133]. Впервые такая система была изучена в [127] в модели с эффективным гамильтонианом, симметричным к перестановке электронных и дырочных базисных блоховских функций.

В принципе, в той же модели [127] краевые состояния могут быть рассчитаны и для КЯ с измененным химическим составом барьерных слоев, а именно, $[0\ 0\ 1]$ КЯ HgTe/CdHgTe [15, 16], необходимо лишь, чтобы в КЯ при некоторой толщине был возможен переход к «инвертированной» системе уровней: первый «дырочный» уровень размерного квантования H_1 (а, точнее, уровень, сформированный преимущественно p -подобными блоховскими функциями объемного CdHgTe) лежал бы по энергии выше, чем первый электронный уровень E_1 (уровень, сформированный преимущественно s -подобными блоховскими функциями объемного HgTe).

Выберем декартову систему координат так, чтобы вдоль кристаллографического направления $[0\ 0\ 1]$ (направления роста КЯ) проходила ось Oz . В этом случае краевые состояния могут распространяться в плоскости Oxy (плоскости КЯ). Для определенности считаем, что вдоль края ямы проходит ось Oy (см. Рисунок 16).

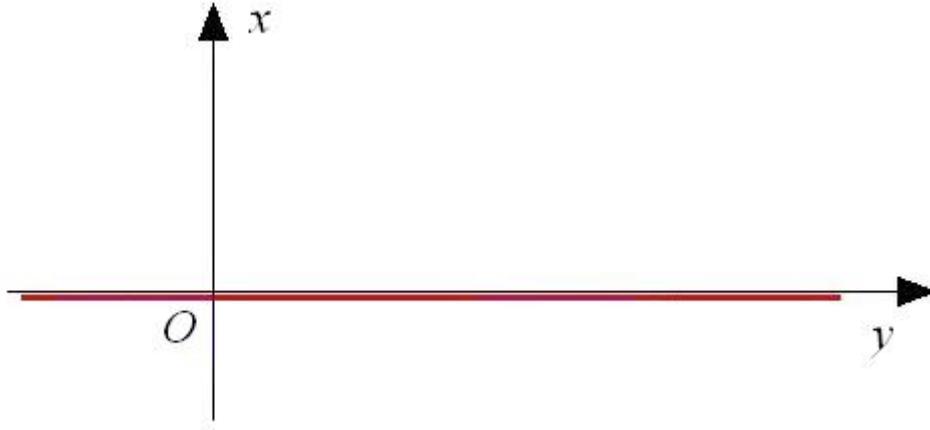


Рисунок 16 – схематическое изображение краевого состояния, распространяющегося вдоль оси Oy .

В [127] показано, что на краю КЯ HgTe/CdTe возникают сопряженные по Крамерсу спин-поляризованные краевые состояния, экспоненциально затухающие вглубь КЯ (в направлении Ox) на глубину $\sim \delta$ и распространяющиеся вдоль края (в направлении Oy). Глубина проникновения δ краевых состояний будет определяться зонными параметрами КЯ [16] и составляет для типичных ТИ $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$ величину порядка 1 нм. Энергетический спектр носителей, локализованных на краю, расположен в запрещенной зоне КЯ и представляет собой линейный конус Дирака [127]:

$$\varepsilon(k_y) = \pm \hbar v_F |k_y|. \quad (5.1)$$

На пространственном масштабе $\sim \delta$ на краю Oy распространяющиеся состояния могут быть описаны $k \cdot p$ -гамильтонианом вида

$$H_{edge}(k_y) = \hbar v_F k_y \hat{\sigma}_z \quad (5.2)$$

где v_F – скорость Ферми краевых состояний, определяемая зонными параметрами КЯ [16].

В присутствии внешнего поля критерием применимости $k \cdot p$ -гамильтониана (5.2) в методе огибающей является пространственная локализация внешнего потенциала: если взаимодействие существует только на краю ТИ, и глубина его проникновения в толщу КЯ не превышает величину δ (короткодействующий потенциал), то для описания возмущенных квантовых состояний на краю КЯ в рамках приближения огибающей функции возможно решать уравнение (1.44) с $k \cdot p$ -гамильтонианом (5.2).

5.2. Модель магнитно-индуцированной квантовой точки на краю двумерного топологического изолятора

Поместим на край 2D ТИ HgTe/CdHgTe на расстоянии L (вдоль оси Oy) друг от друга пару параллельных вертикальных намагниченных ферромагнитных полосок в форме прямоугольного параллелепипеда. Будем считать полоски неограниченными в направлении Oz (роста КЯ), а в направлении Oy – обладающими ширинами h_0 и h_L (Рисунок 17). Переход к неограниченной полоске в направлении Oz справедлив, если ее высота много больше ширины КЯ HgTe/CdHgTe.

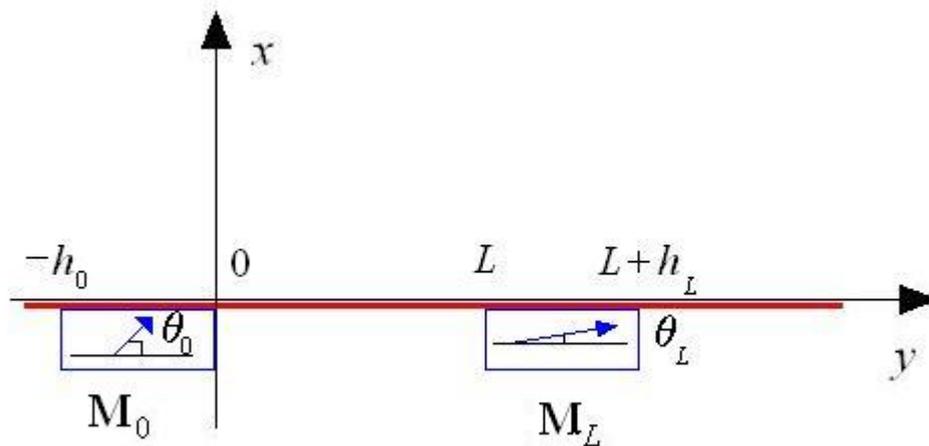


Рисунок 17 – схематическое изображение среза КЯ HgTe/CdHgTe, на край которой нанесена пара вертикальных параллельных намагниченных полосок в форме прямоугольных параллелепипедов.

Будем считать, во-первых, что ферромагнетик, из которого состоят полоски, является диэлектрическим, чтобы пренебречь контактными явлениями на границе «металл / диэлектрик», а также эффектами, связанными с инжекцией носителей из металлического магнетика в диэлектрик. Кроме того, если ширина запрещенной зоны диэлектрика много больше, чем ТИ, то можно положить, что структура краевого состояния на границе не меняется. В качестве такого диэлектрического ферромагнетика может быть использован оксид европия(II) EuO (ширина запрещенной зоны составляет 1.12 эВ и удовлетворяет требуемому условию соотношения между ширинами запрещенных зон КЯ и ферромагнетика).

Во-вторых, будем полагать ферромагнитные образцы в поперечном срезе (плоскости Oxy) наноразмерными: такие наномангниты будут являться однодоменными частицами. В этом случае можно положить намагниченности полосок однородными, а полная намагниченность системы, изображенной на Рисунке 17, примет вид

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{M}_0(\mathcal{G}(y + h_0) - \mathcal{G}(y)) + \mathbf{M}_L(\mathcal{G}(y - L) - \mathcal{G}(y - L - h_L)), \quad (5.3)$$

где \mathbf{M}_0 и \mathbf{M}_L – намагниченности левой и правой полоски соответственно.

Взаимодействие краевого электрона с намагниченностью (5.3) будет двух типов: первое – с магнитным полем, источником которого является наномангнитная полоска, а второе – обменное взаимодействие с атомами ферромагнетика в приповерхностном контактном слое. Ввиду наложенного условия однодоменности, магнитное поле полоски будет малой величиной, так что доминировать будет обменное взаимодействие. В силу короткодействия обменного взаимодействия поиск квантовых состояний в системе, изображенной на Рисунке 17, можно производить с использованием $k\mathbf{p}$ -гамильтониана (5.2). Полагая обмен между крайвым электроном и полосками ферромагнитным, запишем эффективный гамильтониан в виде

$$\hat{H}(y) = \hbar v_F \hat{k}_y \hat{\sigma}_z - J_0(\mathcal{G}(y + h_0) - \mathcal{G}(y))(\mathbf{n}_0 \hat{\boldsymbol{\sigma}}) - J_L(\mathcal{G}(y - L) - \mathcal{G}(y - L - h_L))(\mathbf{n}_L \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \quad (5.4)$$

где J_0 и J_L – энергии обменного взаимодействия электрона с левой и правой намагниченными полосками, обменные энергии краевого электрона в областях непосредственно под полосками, \mathbf{n}_0 и \mathbf{n}_L – единичные векторы, характеризующие направление намагниченности в левой и правой полосках соответственно.

Для формирования локализованных состояний между полосками намагниченности должны быть ориентированы перпендикулярно направлению спиновой поляризации краевых состояний, т.е. перпендикулярно оси Oz , другими словами, полоски следует намагнитить в плоскости КЯ. В этом случае \mathbf{n}_0 и \mathbf{n}_L лежат в плоскости Oxy . Будем отсчитывать углы отклонения полей магнитных полосок от оси Oy (направления распространения краевого состояния), тогда

$$\mathbf{n}_{0,L} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \sin \theta_{0,L} \hat{\sigma}_x + \cos \theta_{0,L} \hat{\sigma}_y, \quad (5.5)$$

где $\theta_{0,L}$ – угол между направлением оси Oy и намагниченностью в левой (правой) полоске (см. Рисунок 17). Полоски с ориентацией намагниченности, приводящей к формированию локализованных состояний между ними, будем называть *магнитными барьерами*.

В областях под магнитными барьерами, как и в случае классических электростатических барьеров, допускаются экспоненциально возрастающие и убывающие решения. Будем считать, что размер полосок порядка или много больше расстояния между ними: $h_{0,L} \sim L$ или $h_{0,L} \gg L$. При реализации этих условий исключим экспоненциально возрастающие решения в

подбарьерных областях и, соответственно, положим ширины магнитных барьеров бесконечно большими, тогда эффективный гамильтониан краевого электрона примет вид:

$$\hat{H}(y) = \hbar v_F \hat{k}_y \hat{\sigma}_z - J_0 \mathcal{G}(-y) (\hat{\sigma}_x \sin \theta_0 + \hat{\sigma}_y \cos \theta_0) - J_L \mathcal{G}(y-L) (\hat{\sigma}_x \sin \theta_L + \hat{\sigma}_y \cos \theta_L). \quad (5.6)$$

Объект, в котором локализован электрон, квантовые состояния которого являются собственными состояниями гамильтониана (5.6), называется *магнитно-индуцированной* КТ на краю 2D ТИ [26], а расстояние L между полосками играет роль ширины такой одномерной КТ.

5.3. Квантовые состояния в магнитно-индуцированной квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора

В отличие от работ [26, 27] будем искать решение уравнения на собственные функции и собственные значения гамильтониана (5.6) при учете протекания волновой функции в подбарьерные области:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f}{\partial y} - \frac{J_0}{\hbar v_F} \mathcal{G}(-y) (\hat{\sigma}_x \cos \theta_0 - \hat{\sigma}_y \sin \theta_0) f - \\ & - \frac{J_L}{\hbar v_F} \mathcal{G}(y-L) (\hat{\sigma}_x \cos \theta_L - \hat{\sigma}_y \sin \theta_L) f - i \frac{E}{\hbar v_F} \hat{\sigma}_z f = 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Уравнение (5.7) позволяет рассчитывать квантовые состояния в магнитно-индуцированных КТ на краю 2D ТИ. В соответствии с алгоритмом, описанным в Главе 1, оно должно быть дополнено условием, накладываемым на огибающую на границах КТ. В модели с проницаемыми магнитными барьерами компоненты огибающей на границах КТ являются непрерывными функциями.

Далее с использованием условий сшивки огибающих на границах КТ получим уравнение для определения энергетического спектра КТ:

$$\frac{(E + i\sqrt{J_0^2 - E^2})(E + i\sqrt{J_L^2 - E^2})}{J_0 J_L} = \exp(2iEL/\hbar v_F - i(\theta_L - \theta_0)). \quad (5.8)$$

Поскольку (5.8) связывает 2 комплексные функции, а решения являются чисто действительными (энергия), то такое комплексное уравнение следует свести к системе двух уравнений, связывающих действительные функции:

$$\begin{cases} E^2 - \sqrt{J_0^2 - E^2} \cdot \sqrt{J_L^2 - E^2} = J_0 J_L \cos(2EL/\hbar v_F - (\theta_L - \theta_0)), \\ E(\sqrt{J_0^2 - E^2} + \sqrt{J_L^2 - E^2}) = J_0 J_L \sin(2EL/\hbar v_F - (\theta_L - \theta_0)). \end{cases} \quad (5.9)$$

Обратим внимание, что полученная система действительных уравнений зависит только от относительной разницы в направлениях намагниченностей в левом и правом барьерах $\theta_L - \theta_0$, а, следовательно, и энергия зависит не от двух углов-параметров θ_0 и θ_L , а от одного

$\theta_L - \theta_0$. Кроме того, при перестановке местами J_0 и J_L уравнения, позволяющие определить E , не меняются. Таким образом, энергия не зависит от того, с какой стороны находится барьер с большей по модулю намагниченностью.

Ввиду того, что барьеры на левой и правой границах характеризуются двумя параметрами – эффективными высотами $J_{0,L}$ и углами $\theta_{0,L}$ – необходимо определить, какие барьеры будем понимать как симметричные. Будем называть симметричной такую магнитно-индуцированную КТ, у которой левый и правый барьеры обладают одинаковой «высотой», т.е.

$$J_0 = J_L \equiv J. \quad (5.10)$$

В случае симметричной магнитно-индуцированной КТ уравнение (5.8) сводится к системе:

$$\begin{cases} 2E^2 - J^2 = J^2 \cos(2EL/\hbar v_F - (\theta_L - \theta_0)), \\ 2E\sqrt{J^2 - E^2} = J^2 \sin(2EL/\hbar v_F - (\theta_L - \theta_0)). \end{cases} \quad (5.11)$$

Если $-\pi < \theta_L - \theta_0 < \pi$, то в симметричной магнитно-индуцированной КТ при сколь угодно малой высоте барьеров или сколь угодно малой ширине L будет 2 уровня, в частности, в наиболее интересном случае $\theta_L - \theta_0 = 0$ эта пара уровней в КТ будет расположена симметрично относительно точки Дирака. Если же $\theta_L - \theta_0 = \pm\pi$, то в КТ при сколь угодно малой высоте барьеров или сколь угодно малой ширине будет только 1 уровень, энергия которого равна нулю.

В общем случае система (5.9) имеет n невырожденных решений E_n , каждому из которых отвечает двухкомпонентная огибающая вида:

$$f_n(y < 0) = \frac{\exp\left(\frac{\sqrt{J_0^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} y\right)}{\sqrt{\frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_0^2 - E_n^2}} + 2L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_L^2 - E_n^2}}}} \left(-\frac{i\sqrt{J_0^2 - E_n^2} + E_n}{J_0} \exp(i\theta_0) \right), \quad (5.12)$$

$$f_n(0 < y < L) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_0^2 - E_n^2}} + 2L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_L^2 - E_n^2}}}} \left(\frac{\exp(iE_n y/\hbar v_F)}{i\sqrt{J_0^2 - E_n^2} + E_n} \exp(i\theta_0 - iE_n y/\hbar v_F) \right), \quad (5.13)$$

$$f_n(y > L) = \frac{\exp\left(\frac{iE_n L}{\hbar v_F} + \frac{\sqrt{J_L^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} (L - y)\right)}{\sqrt{\frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_0^2 - E_n^2}} + 2L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J_L^2 - E_n^2}}}} \left(\frac{i\sqrt{J_L^2 - E_n^2} - E_n}{J_L} \exp(i\theta_L) \right). \quad (5.14)$$

В случае симметричной КТ ($J_0 = J_L \equiv J$) получим огибающие вида:

$$f_n(y < 0) = \frac{\exp\left(\frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} y\right)}{\sqrt{2\left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)}} \left(-\frac{i\sqrt{J^2 - E_n^2} + E_n}{J} \exp(i\theta_0) \right), \quad (5.15)$$

$$f_n(0 < y < L) = \frac{1}{\sqrt{2\left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)}} \left(-\frac{\exp(iE_n y/\hbar v_F)}{i\sqrt{J^2 - E_n^2} + E_n} \exp(i\theta_0 - iE_n y/\hbar v_F) \right), \quad (5.16)$$

$$f_n(y > L) = \frac{\exp\left(\frac{iE_n L}{\hbar v_F} + \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} (L - y)\right)}{\sqrt{2\left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)}} \left(\frac{i\sqrt{J^2 - E_n^2} - E_n}{J} \exp(i\theta_L) \right). \quad (5.17)$$

Огибающие позволяют описать наблюдаемые свойства электронных состояний в КТ, в частности, их спиновые поляризации.

5.4. Спиновая плотность и поляризация состояний в симметричной магнитно-индуцированной квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора

Приведем в этом разделе аналитические выражения, описывающие спиновые плотности и спиновые поляризации состояний в исследуемых КТ. Ненулевые компоненты спиновой поляризации будут возникать как следствие нарушения симметрии по отношению к обращению времени, другими словами, будут отвечать только тем направлениям, вдоль которых в системе имеется ненулевая намагниченность.

$$S_x(n, y) = \frac{\hbar}{2} \cdot f_n^+(y) \hat{\sigma}_x f_n(y) \text{ — плотность } x\text{-ой компоненты спина в } n\text{-ом квантовом}$$

состоянии. В симметричной магнитно-индуцированной КТ на краю 2D ТИ имеем:

$$S_x(n, y < 0) = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\left(\sqrt{J^2 - E_n^2} \sin \theta_0 - E_n \cos \theta_0\right)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \exp\left(2 \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} y\right), \quad (5.18)$$

$$S_x(n, 0 < y < L) = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2} \sin(2E_n y/\hbar v_F - \theta_0) - E_n \cos(2E_n y/\hbar v_F - \theta_0)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)}, \quad (5.19)$$

$$S_x(n, y > L) = -\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\left(\sqrt{J^2 - E_n^2} \sin \theta_L + E_n \cos \theta_L\right)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \exp\left(2 \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} (L - y)\right). \quad (5.20)$$

$\bar{S}_x(n) = \frac{\hbar}{2} \langle f_n | \hat{\sigma}_x | f_n \rangle$ – спиновая поляризация n -ого квантового состояния вдоль

направления x . В симметричной магнитно-индуцированной КТ на краю 2D ТИ имеем:

$$\begin{aligned} \bar{S}_x(n) = & -\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar v_F}{2J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \left(\sin\left(\frac{2E_n L}{\hbar v_F} - \theta_0\right) + \sin \theta_L + \frac{E_n}{\sqrt{J^2 - E_n^2}} \cos \theta_0 + \right. \\ & \left. + \frac{E_n}{\sqrt{J^2 - E_n^2}} \cos \theta_L + \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{E_n} \cos \theta_0 - \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{E_n} \cos\left(\frac{2E_n L}{\hbar v_F} - \theta_0\right) \right). \end{aligned} \quad (5.21)$$

$S_y(n, y) = \frac{\hbar}{2} \cdot f_n^+(y) \hat{\sigma}_y f_n(y)$ – плотность y -ой компоненты спина в n -ом квантовом

состоянии. В симметричной магнитно-индуцированной КТ на краю 2D ТИ имеем:

$$S_y(n, y < 0) = -\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\left(\sqrt{J^2 - E_n^2} \cos \theta_0 + E_n \sin \theta_0\right)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \exp\left(2 \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} y\right), \quad (5.22)$$

$$S_y(n, 0 < y < L) = -\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2} \cos(2E_n y / \hbar v_F - \theta_0) - E_n \sin(2E_n y / \hbar v_F - \theta_0)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)}, \quad (5.23)$$

$$S_y(n, y > L) = \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\left(\sqrt{J^2 - E_n^2} \cos \theta_L - E_n \sin \theta_L\right)}{J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \exp\left(2 \cdot \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{\hbar v_F} (L - y)\right). \quad (5.24)$$

$\bar{S}_y(n) = \frac{\hbar}{2} \langle f_n | \hat{\sigma}_y | f_n \rangle$ – спиновая поляризация n -ого квантового состояния вдоль

направления y . В симметричной магнитно-индуцированной КТ на краю 2D ТИ имеем:

$$\begin{aligned} \bar{S}_y(n) = & -\frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\hbar v_F}{2J \left(L + \frac{\hbar v_F}{\sqrt{J^2 - E_n^2}}\right)} \cdot \left(\cos\left(\frac{2E_n L}{\hbar v_F} - \theta_0\right) + \cos \theta_L + \frac{E_n}{\sqrt{J^2 - E_n^2}} \sin \theta_0 - \right. \\ & \left. - \frac{E_n}{\sqrt{J^2 - E_n^2}} \sin \theta_L + \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{E_n} \sin \theta_0 + \frac{\sqrt{J^2 - E_n^2}}{E_n} \sin\left(\frac{2E_n L}{\hbar v_F} - \theta_0\right) \right). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Наши расчеты показывают, что не только спиновая поляризация, но и локальная спиновая плотность вдоль направления Oz равна нулю.

5.5. Заключительные замечания по Главе 5

Используя общие выражения для спиновой плотности и спиновой поляризации квантовых состояний в магнитно-индуцированных КТ на краю 2D ТИ в частном случае КТ с двумя уровнями, симметрично расположенными относительно точки Дирака (наиболее важный случай равных намагниченностей полосок), видно, что спиновые поляризации двух состояний в такой КТ равны по величине и противоположно направлены. Отсюда можно заключить, что КТ с равными намагниченностями барьеров при небольшой ширине (~ 20 нм) может быть использована как модель кубита.

В заключение добавим, что решение задачи о спектре магнитно-индуцированной КТ при непроницаемых магнитных барьерах, приведенное в [25, 26], может быть выведено из полученных нами выражений в случае симметричной КТ в пределе $J \rightarrow \infty$.

5.6. Выводы по Главе 5

1. Электронные состояния в магнитно-индуцированных КТ на краю 2D ТИ могут быть рассчитаны с помощью приближения огибающей функции с применением $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ -гамильтониана, отвечающего распространенным краевым состояниям.

2. При равных намагниченностях магнитных полосок на краю 2D ТИ между ними возникает система невырожденных локализованных состояний, таких, что в магнитно-индуцированной КТ всегда четное число энергетических уровней, две половины которых симметрично расположены относительно точки Дирака. В такой КТ при сколь угодно малой ширине и величине намагниченностей барьеров будет как минимум пара уровней с противоположной спиновой поляризацией, что может быть использовано как модель кубита.

Заключение

Приведем здесь основные результаты диссертационного исследования и выводы по проделанной работе.

1. На основе анализа экспериментальных данных спектроскопии электронного парамагнитного резонанса и эффекта Холла в образцах объемного кремния, легированных тяжелой примесью висмута, и сравнения с аналогичной информацией, имеющейся для кремния, легированного сравнительно легкими донорами (например, литием и фосфором), показано, что примесь висмута вносит в кремниевую матрицу сильное остаточное атомное спин-орбитальное взаимодействие. Такое спин-орбитальное взаимодействие необходимо учитывать при исследовании квантовых состояний в методе огибающей функции наряду с кристаллическим спин-орбитальным взаимодействием.

2. Вследствие межзонной спин-орбитальной связи зоны проводимости и валентной зоны, волновые функции в зоне проводимости сферических кремниевых нанокристаллов являются нетривиальными двухкомпонентными спинорами, причем параметр спинового смешивания, характеризующий степень отклонения волновых функций от «чистых» по спину, является возрастающей функцией радиуса кристаллита в диапазоне от 1 до 5 нм.

3. Построена оригинальная теория температурной зависимости g -фактора электронов проводимости в объемном кремнии, позволяющая описать зависимость экспериментально наблюдаемого положения линии электронного парамагнитного резонанса в диапазоне от 80 до 250 К. Теория базируется на перенормировке электронного спектра при взаимодействии с равновесным фононным резервуаром.

4. Рассчитаны оптическая щель и скорости излучательной рекомбинации в нанокристаллах GaN кубической и гексагональной фаз, внедренных в аморфные диэлектрические матрицы SiO_2 , Al_2O_3 , HfO_2 и Si_3N_4 , с радиусами от 1 до 3 нм. Показано, что длина волны излучения нанокристаллов лежит в ультрафиолетовом диапазоне спектра с нижней границей ~ 250 нм. Результаты предсказывают, что наиболее перспективным с точки зрения оптических приложений является внедрение нанокристаллов GaN в матрицы HfO_2 и Si_3N_4 .

5. Изучены электронные состояния в квантовых точках, образованных между парой намагниченных ферромагнитных диэлектрических полосок, нанесенных на край двумерного топологического изолятора $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$. Показано, что при равной намагниченности полосок в квантовой точке всегда будет четное число уровней, симметрично расположенных относительно точки Дирака, причем при сколь угодно малой ширине пара из них всегда будет оставаться.

Благодарности

Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю д. ф.-м. н., доц. В. А. Бурдову за помощь и поддержку в выполнении работы и стимулирующие обсуждения, без которых не состоялась бы представленная диссертация. Автор также искренне благодарит асс. кафедры теоретической физики физического факультета ННГУ Н. В. Дербеневу за постоянные обсуждения и неоценимую помощь в решении ряда задач, стоявших перед ним.

Кроме того, автор глубоко признателен своим соавторам: проф. А. А. Ежевскому, к. ф.-м. н. Д. В. Гусейнову, к. ф.-м. н. А. В. Сухорукову, к. ф.-м. н. С. А. Попкову, к. ф.-м. н. А. В. Кудрину, к. т. н. Н. В. Абросимову, д-ру Х. Риманну (H. Riemann), асп. кафедры физики полупроводников и оптоэлектроники физического факультета ННГУ А. П. Деточенко, студ. магистратуры Санкт-Петербургского государственного университета А. В. Королевой, проф. Д. И. Тетельбауму, д. ф.-м. н. Д. О. Филатову, к. ф.-м. н. А. Н. Михайлову, к. ф.-м. н. А. И. Белову, д-ру М. Кумару (M. Kumar), асп. кафедры электроники твердого тела физического факультета ННГУ Д. С. Королеву, доц. Д. В. Хомицкому, выпускнику каф. теоретической физики физического факультета ННГУ А. А. Чубанову.

Считаю также своим долгом поблагодарить доц. Г. М. Максимову и проф. А. М. Сатанина за многочисленные стимулирующие обсуждения в течение всего времени выполнения диссертационной работы.

Отдельно хочется сказать несколько хороших слов о своих молодых коллегах с каф. теоретической физики физического факультета ННГУ, работа с которыми также во многом способствовала тому, что диссертация состоялась: асп. А. С. Козулине и магистранте А. В. Мишине.

Наконец, хочется выразить благодарность всему коллективу кафедры теоретической физики за создание атмосферы, несомненно способствовавшей написанию диссертации, а также всем сотрудникам физического факультета, Научно-исследовательского физико-технического института и НОЦ «Физика твердотельных наноструктур» ННГУ, у которых мне сначала посчастливилось учиться, и вместе с которыми я сейчас имею честь работать.

Список работ автора по теме диссертационного исследования

Публикации в рецензируемых научных изданиях, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук:

A1. Konakov, A. A. Optical gap of silicon crystallites embedded in various wide-band amorphous matrices: role of environment / A. A. Konakov, V. A. Burdov // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2010. – Vol. 22, No 21. – P. 215301-1–215301-7.

A2. Lande factor of the conduction electrons in silicon: temperature dependence / A. A. Konakov, A. A. Ezhevskii, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, S. A. Popkov, V. A. Burdov // Journal of Physics: Conference Series. – 2011. – Vol. 324. – P. 012027-1–012027-4.

A3. Temperature dependence of the conduction electron g-factor in silicon: theory and experiment / A. A. Konakov, A. A. Ezhevskii, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, S. A. Popkov, V. A. Burdov // Magnetic Resonance in Solids. Electronic Journal. – 2011. – Vol. 13, No 2. – P. 14–20.

A4. Температурная перенормировка g-фактора электронов проводимости в кремнии / A. A. Конаков, В. А. Бурдов, А. А. Ежевский, А. В. Сухоруков, Д. В. Гусейнов, С. А. Попков // Физика и техника полупроводников. – 2012. – Т. 46, № 12. – С. 1604–1608 [Temperature renormalization of the conduction electron g-factor in silicon / A. A. Konakov, V. A. Burdov, A. A. Ezhevskii, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, S. A. Popkov // Semiconductors. – 2013. – Vol. 47, No 1. – P. 169–173].

A5. Конаков, А. А. Влияние спин-орбитального взаимодействия на структуру основного состояния электронов в кремниевых нанокристаллах / А. А. Конаков, Н. В. Курова, В. А. Бурдов // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47, № 11. – С. 1521–1525 [Konakov, A. A. Effect of spin-orbit coupling on the structure of the electron ground state in silicon nanocrystals / A. A. Konakov, N. V. Kurova, V. A. Burdov // Semiconductors. – 2013. – Vol. 47, No 11. – P. 1508–1512].

A6. Temperature and donor concentration dependence of the conduction electron Lande g-factor in silicon / A. A. Konakov, A. A. Ezhevskii, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, S. A. Popkov, V. A. Burdov // AIP Conference Proceedings. – 2013. – Vol. 1566. – P. 321–322.

A7. Monoisotopic ^{28}Si in spin resonance spectroscopy of electrons localized on shallow donors / A. A. Ezhevskii, S. A. Popkov, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, A. A. Konakov, N. V. Abrosimov, H. Riemann // Solid State Phenomena. – 2014. – Vol. 205–206. – P. 191–200.

A8. The impurity spin-dependent scattering effects in the transport and spin resonance of conduction electrons in bismuth doped silicon / A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, A. V. Kudrin,

S. A. Popkov, A. P. Detochenko, A. V. Koroleva, A. A. Ezhevskii, A. A. Konakov, N. V. Abrosimov, H. Riemann // *Solid State Phenomena*. – 2016. – Vol. 242. – P. 327–331.

A9. Electronic states in spherical GaN nanocrystals embedded in various dielectric matrices: The k - p -calculations / A. A. Konakov, D. O. Filatov, D. S. Korolev, A. I. Belov, A. N. Mikhaylov, D. I. Tetelbaum, M. Kumar // *AIP Advances*. – 2016. – Vol. 6, No 1. – P. 015007-1–015007-11.

Публикации в архиве электронных препринтов научных статей arXiv.org:

A10. Khomitsky, D. V. Regular and irregular dynamics of Dirac-Weyl wavepackets in a mesoscopic quantum dot at the edge of topological insulator / D. V. Khomitsky, A. A. Chubakov, A. A. Konakov // <http://arxiv.org/pdf/1408.1544v4.pdf>.

Учебно-методические пособия:

A11. Сухоруков, А. В. Спиновая релаксация электронов с различной степенью локализации в кремнии с изменённым изотопным составом: учебно-методическое пособие / А. В. Сухоруков, Д. В. Гусейнов, А. А. Конаков. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2011. – 39 с.

Перечень сокращений и условных обозначений

Сокращения

КТ	квантовая точка
КЯ	квантовая яма
НК	нанокристалл
ПЭМ	просвечивающая электронная микроскопия
СОВ	спин-орбитальное взаимодействие
ТФП	теория функционала плотности
ТИ	топологический изолятор
УФ	ультрафиолетовый
ФЛ	фотолюминесценция
функции К.-Л.	функции Кона-Латтинджера
ФГ	функция Грина
ЭСР	электронный спиновый резонанс

Условные обозначения

N	азот
τ_r^{-1}	вероятность излучательной рекомбинации в единицу времени
τ_p^{-1}	вероятность изменения импульса в единицу времени
τ_s^{-1}	вероятность переворота спина в единицу времени
Bi	висмут
Ga	галлий
2D	двумерный
HfO ₂	диоксид гафния
SiO ₂	диоксид кремния
<i>B.z.</i>	зона Бриллюэна
N _{Bi}	концентрация висмута
N _{Li}	концентрация лития
Si	кремний
Si:Bi	кремний, легированный висмутом
Si:Li	кремний, легированный литием
Si:P	кремний, легированный фосфором
c-GaN	кубический нитрид галлия

Li	литий
μ_B	магнетон Бора
m_0	масса свободного электрона
GaN	нитрид галлия
w-GaN	нитрид галлия, кристаллизующийся в структуре вюрцита
Si ₃ N ₄	нитрид кремния
W	объем кристалла
Ω_0	объем элементарной ячейки кристалла
Al ₂ O ₃	оксид алюминия
b_{SO}	параметр межзонного спинового смешивания
E_{abs}	поглощенная в ЭСР энергия
k_B	постоянная Больцмана
\hbar	постоянная Планка
m_t	поперечная эффективная масса в зоне проводимости полупроводника
m_l	продольная эффективная масса в зоне проводимости полупроводника
R	радиус нанокристалла
ΔE_v	разрыв валентной зоны на границе раздела полупроводника и диэлектрика
ΔE_c	разрыв зоны проводимости на границе раздела полупроводника и диэлектрика
α -Al ₂ O ₃	сапфир
c	скорость света в вакууме
CdHgTe	твердый раствор кадмий-ртуть-теллур
HgTe	теллурид ртути
T	температура
3D	трехмерный
m_{aver}	усредненная по направлениям в k -пространстве эффективная масса
g_0	фактор Ландэ (<i>g</i> -фактор) свободного электрона
P	фосфор
$\mathcal{J}(x)$	функция Хевисайда своего аргумента

τ_p	характерное время релаксации импульса
τ_r	характерное время излучательной рекомбинации
G	число элементарных ячеек в кристалле
e_0	элементарный заряд
E_h	энергия основного состояния дырки в нанокристалле
E_e	энергия основного состояния электрона в нанокристалле
g	эффективный фактор Ландэ (g -фактор) электрона

Список литературы

1. Emmett, W. W. The channels and waters of the Upper Salmon River area, Idaho. (Hydrologic evaluation of the Upper Salmon River area, Idaho): Geological Survey Professional Paper 870–A / United States Government Printing Office, Washington D.C. 20402, 1975.– 116 p.
2. Silicon Nanophotonics: Basic Principles, Present status and Perspectives / ed. L. Khriachtchev. – Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2009. – 452 p. – ISBN: 978-981-4241-11-3.
3. Silicon Nanocrystals: fundamentals, synthesis and applications / ed. L. Pavesi, R. Turan. – Weinheim: Wiley-VCH, 2010. – 627 p. – ISBN: 978-3-527-32160-5.
4. Silicon spintronics with ferromagnetic tunnel devices / R. Jansen, S. P. Dash, S. Sharma, B. C. Min // *Semiconductor Science and Technology*. – 2012. – Vol. 27, No 8. – P. 083001-1–083001-26.
5. Appelbaum, I. Electronic measurement and control of spin transport in silicon / I. Appelbaum, B. Huang, D. J. Monsma // *Nature*. – 2007. – Vol. 447, No 7142. – P. 295–298.
6. Electrical creation of spin polarization in silicon at room temperature / S. P. Dash, S. Sharma, R. S. Patel, M. P. de Jong, R. Jansen // *Nature*. – 2009. – Vol. 462, No 7272. – P. 491–494.
7. Wu, M. W. Spin dynamics in semiconductors / M. W. Wu, J. H. Jiang, M. Q. Weng // *Physics Reports*. – 2010. – Vol. 493, No 2–4. – P. 61–236.
8. A role for graphene in silicon-based semiconductor devices / K. Kim, J.-Y. Choi, T. Kim, S.-H. Cho, H.-J. Chung // *Nature*. – 2011. – Vol. 479, No 7373. – P. 338–344.
9. Болховитянов, Ю. Б. Эпитаксия GaAs на кремниевых подложках: современное состояние исследований и разработок / Ю. Б. Болховитянов, О. П. Пчеляков // *Успехи физических наук*. – 2008. – Т. 178, № 5. – С. 459–480.
10. Epitaxial growth of Bi₂Se₃ topological insulator thin films on Si (111) / L. He, F. Xiu, Y. Wang, A. V. Fedorov, G. Huang, X. Kou, M. Lang, W. P. Beyermann, J. Zou, K. L. Wang // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – Vol. 109, No 10. – P. 103702-1–103702-6.
11. MBE growth optimization of topological insulator Bi₂Te₃ films / J. Krumrain, G. Mussler, S. Borisova, T. Stoica, L. Plucinski, C. M. Schneider, D. Grützmacher // *Journal of Crystal Growth*. – 2011. – Vol. 324, No 1. – P. 115–118.
12. GaN-based epitaxy on silicon: stress measurements / A. Krost, A. Dadgar, G. Strassburger, R. Clos // *Physica status solidi (a)*. – 2003. – Vol. 200, No 1. – P. 26–35.
13. Synthesis of GaN quantum dots by ion implantation in dielectrics / E. Borsella, M. A. Garcia, G. Mattei, C. Maurizio, P. Mazzoldi, E. Cattaruzza, F. Gonella, G. Battaglin, A. Quaranta, F. D'Acapito // *Journal of Applied Physics*. – 2001. – Vol. 90, No 9. – P. 4467–4472.

14. Synthesis of wide band gap nanocrystals by ion implantation / E. Borsella, C. de Julian Fernandez, M. A. Garcia, G. Mattei, C. Maurizio, P. Mazzoldi, S. Padovani, C. Sada, G. Battaglin, E. Cattaruzza, F. Gonella, A. Quaranta, F. D'Acapito, M. A. Tagliente, L. Tapfer // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms.* – 2002. – Vol. 191, No 1–4. – P. 447–451.
15. Hasan, M. Z. Colloquium: Topological insulators / M. Z. Hasan, C. L. Kane // *Reviews of Modern Physics.* – 2010. – Vol. 82, No 4. – P. 3045–3067.
16. Qi, X.-L. Topological insulators and superconductors / X.-L. Qi, S.-C. Zhang // *Reviews of Modern Physics.* – 2011. – Vol. 83, No 4. – P. 1057–1110.
17. Topological Insulator Quantum Dot with Tunable Barriers / S. Cho, D. Kim, P. Syers, N. P. Butch, J. Paglione, M. S. Fuhrer // *Nano Letters.* – 2012. – Vol. 12, No 1. – P. 469–472.
18. Roth, L. M. g Factor and Donor Spin-Lattice Relaxation for Electrons in Germanium and Silicon / L. M. Roth // *Physical Review.* – 1960. – Vol. 118, No 6 – P. 1534–1540.
19. Feher, G. Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. I. Electronic Structure of Donors by the Electron Nuclear Double Resonance Technique / G. Feher // *Physical Review.* – 1959. – Vol. 114, No 5. – P. 1219–1244.
20. Liu, L. Valence spin-orbit splitting and conduction g tensor in Si / L. Liu // *Physical Review Letters.* – 1961. – Vol. 6, No 12. – P. 683–685.
21. Stesmans, A. ESR observation of temperature-dependent g shifts in submetallic P-doped Si at low temperatures / A. Stesmans, G. De Vos // *Physical Review B.* – 1986. – Vol. 34, No 9. – P. 6499–6502.
22. Spin relaxation and spin-diffusion length of conduction electrons in silicon with different compositions of isotopes / A. A. Ezhevskii, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, S. A. Popkov, A. V. Gusev, V. A. Gavva. // *AIP Conference Proceedings.* – 2011. – Vol. 1399. – P. 743–744.
23. Bagga, A. Energy levels of nitride quantum dots: wurtzite versus zinc-blende structure / A. Bagga, P. K. Chattopadhyay, S. Ghosh // *Physical Review B.* – 2003. – Vol. 68, No 15. – P. 155331-1–155331-10.
24. Бурдов, В. А. Зависимость ширины оптической щели кремниевых квантовых точек от их размера / В. А. Бурдов // *Физика и техника полупроводников.* – 2002. – Т. 36, № 10. – С. 1233–1236.
25. Ferreira, G. J. Magnetically Defined Qubits on 3D Topological Insulators / G. J. Ferreira, D. Loss // *Physical Review Letters.* – 2013. – Vol. 111, No 10. – P.106802-1–106802-5.
26. Timm, C. Transport through a quantum spin Hall quantum dot / C. Timm // *Physical Review B.* – 2012. – Vol. 86, No 15. – P. 155456-1–155456-6.

27. Coulomb blockade microscopy of spin-density oscillations and fractional charge in quantum spin Hall dots / G. Dolcetto, N. Traverso Ziani, M. Biggio, F. Cavaliere, M. Sassetti // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 87, No 23. – P. 235423.
28. Honenberg, P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Honenberg, W. Kohn // *Physical Review*. – 1964. – Vol. 136, No 3B. – P. B864–B871.
29. Kohn, W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Physical Review*. – 1965. – Vol. 140, No 4A. – P. A1133–A1138.
30. Perdew, J. P. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems / J. P. Perdew, A. Zunger // *Physical Review B*. – 1981. – Vol. 23, No 10. – P. 5048–5079.
31. Shishkin, M. Accurate Quasiparticle Spectra from Self-Consistent *GW* Calculations with Vertex Corrections / M. Shishkin, M. Marsman, G. Kresse // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99, No 24. – P. 246403-1–246403-4.
32. Delley, B. Size dependence of band gaps in silicon nanostructures / B. Delley, E. F. Steigmeier // *Applied Physics Letters*. – 1995. – Vol. 67, No 16. – P. 2370–2372.
33. Casida, M.E. Time-dependent density functional response theory for molecules / M.E. Casida // *Recent advances in computational chemistry*. – 1995. – Vol. 1, No 1. – P. 155–192.
34. Lee, C. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R. G. Parr // *Physical Review B*. – 1988. – Vol. 37, No 2. – P. 785–789.
35. Zhao, Y. The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals / Y. Zhao, D. G. Truhlar // *Theoretical Chemistry Accounts*. – 2008. – Vol. 120, No 1. – P. 215–241.
36. Delerue C., Lannoo M. *Nanostructures: Theory & modelling* / Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004. – 304 p. – ISBN 81-8128-200-0.
37. Strain and electric field control of hyperfine interactions for donor spin qubits in silicon / M. Usman, C. D. Hill, R. Rahman, G. Klimeck, M. Y. Simmons, S. Rogge, L. C. L. Hollenberg // *Physical Review B*. – 2015. – Vol. 91, No 24. – P. 245209-1–245209-8.
38. Bester, G. Electronic excitations in nanostructures: an empirical pseudopotential based approach / G. Bester // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – Vol. 21, No 2. – P. 023202-1–023202-19.
39. Large-scale atomic effective pseudopotential program including an efficient spin-orbit coupling treatment in real space / F. Zirkelbach, P.-Y. Prodhomme, P. Han, R. Cherian, G. Bester // *Physical Review B*. – 2015. – Vol. 91, No 7. – P. 075119-1–075119-16.

40. Bastard G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / Les editions de physique, JOUVE, Paris, 1990. – 358 p. – ISBN 2-86883-092-7.
41. Бир, Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. – Москва: Издательство «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1972. – 584 с.
42. Wannier, G. H. The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals / G. H. Wannier // Physical Review. – 1937. – Vol. 52, No 3. – P. 191–197.
43. Maximally localized Wannier functions: Theory and applications / N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, D. Vanderbilt // Reviews of Modern Physics. – 2012. – Vol. 84, No 4. – P. 1419–1475.
44. Adams, E. N. The Crystal Momentum as a Quantum Mechanical Operator / E. N. Adams // The Journal of Chemical Physics. – 1953. – Vol. 21, No 11. – P. 2013–2017.
45. Luttinger, J. M. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields / J. M. Luttinger, W. Kohn // Phys. Rev. – 1955. – Vol. 97, No 4. – P. 869–883.
46. Willatzen, M. The $k\cdot p$ Method: Electronic Properties of Semiconductors / M. Willatzen, L. C. Lew Yan Voon. – Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2009. – 445 p. – ISBN: 978-3-540-92871-3.
47. Kittel, C. Theory of Donor and Acceptor States in Silicon and Germanium / C. Kittel, A. H. Mitchell // Physical Review. – 1954. – Vol. 96, No 6. – P. 1488–1493.
48. Resca, L. Large binding due to dispersive screening and bloch function interference in many-valley semiconductors / L. Resca, R. Resca // Solid State Communications. – 1979. – Vol. 29, No 3. – P. 275–277.
49. Resca, L. Shallow-Deep Instabilities of Donor Impurity Levels and Excitons in Many-Valley Semiconductors / L. Resca, R. Resca // Physical Review Letters. – 1980. – Vol. 44, No 20. – P. 1340-1344.
50. Wu, Z. Electron tunneling through double magnetic barriers on the surface of a topological insulator / Z. Wu, F. M. Peeters, K. Chang // Physical Review B. – 2010. – Vol. 82, No 11. – P. 115211-1–115211-7.
51. Löwdin, P.-O. A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory / P.-O. Löwdin // The Journal of Chemical Physics. – 1951. – Vol. 19, No 11. – P. 1396–1401.
52. Belyakov, V. A. Valley-orbit splitting in doped nanocrystalline silicon: $k\cdot p$ calculations / V. A. Belyakov, V. A. Burdov // Physical Review B. – 2007. – Vol. 76, No 4. – P. 045335-1–045335-12.
53. Тахтамиров, Э. Е. Метод огибающих функций и междолинное Γ - X_z -взаимодействие состояний в полупроводниковых гетероструктурах A_3B_5 в плоскости (001) / Э. Е. Тахтамиров,

B. A. Волков // ЖЭТФ. – 2000. – Т. 117, № 6. – С. 1221–1229.

54. Winkler, R. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems / R. Winkler. – Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2003. – 228 p. – ISBN: 978-3-540-01187-3.

55. The Impurity Spin-Dependent Scattering Effects in the Transport and Spin Resonance of Conduction Electrons in Bismuth Doped Silicon / A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, A. V. Kudrin, S. A. Popkov, A. P. Detochenko, A. V. Koroleva, A. A. Ezhevskii, A. A. Konakov, N. V. Abrosimov, H. Riemann // Solid State Phenomena. – 2016. – Vol. 242. – P. 327–331.

56. Monoisotopic ^{28}Si in spin resonance spectroscopy of electrons localized on shallow donors / A. A. Ezhevskii, S. A. Popkov, A. V. Soukhorukov, D. V. Guseinov, A. A. Konakov, N. V. Abrosimov, H. Riemann // Solid State Phenomena. – 2014. – Vol. 205–206. – P. 191–200.

57. Maekawa, S. Electron Spin Resonance in Phosphorus Doped Silicon at Low Temperatures / S. Maekawa, N. Kinoshita // Journal of the Physical Society of Japan. – 1965. – Vol. 20, No 8. – P. 1447–1457.

58. Elliott, R. J. Theory of the Effect of Spin-Orbit Coupling on Magnetic Resonance in Some Semiconductors / R. J. Elliott // Physical Review. – 1954. – Vol. 96, No 2. – P. 266–279.

59. Yafet, Y. g factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons / Y. Yafet // Solid State Physics: Advances in Research and Applications. Vol. 14 / F. Seitz, D. Turnbull (Eds.) – New York: Academic Press, 1963. – P. 1–98. ISBN: 978-0126077148.

60. Cheng, J. L. Theory of the Spin Relaxation of Conduction Electrons in Silicon / J. L. Cheng, M. W. Wu, J. Fabian // Physical Review Letters. – 2010. – Vol. 104, No 1. – P. 016601-1–016601-4.

61. Song, Y. Analysis of phonon-induced spin relaxation processes in silicon / Y. Song, H. Dery // Physical Review B. – 2012. – Vol. 86, No 8. – P. 085201-1–085201-28.

62. Song, Y. Donor-Driven Spin Relaxation in Multivalley Semiconductors / Y. Song, O. Chalaev, H. Dery // Physical Review Letters. – 2014. – Vol. 113, No 16. – P. 167201-1–167201-5.

63. Ramdas, A. K. Spectroscopy of the solid-state analogues of the hydrogen atom: donors and acceptors in semiconductors / A. K. Ramdas, S. Rodriguez // Reports on Progress in Physics. – 1981. – Vol. 44, No 12. – P. 1297–1387.

64. Москаленко, А. С. Экситоны в нанокристаллах Si / А. С. Москаленко, И. Н. Ясиевич // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, № 8. – С. 1465–1475.

65. Scholes, G. D. Excitons in nanoscale systems / G. D. Scholes, G. Rumbles // Nature Materials. – 2006. – Vol. 5, No 9. – P. 683–696.

66. Silicon Nanocrystals: Fundamental Theory and Implications for Stimulated Emission / V. A. Belyakov, V. A. Burdov, R. Lockwood, A. Meldrum // Advances in Optical Technologies. – 2008. – Vol. 2008. – P. 279502-1–279502-32.

67. Quantum confinement in Si and Ge nanostructures / E. G. Barbagiovanni, D. J. Lockwood, P. J. Simpson, L. V. Goncharova // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – Vol. 111, No 3. – P. 034307-1–034307-9.

68. Излучение кремниевых нанокристаллов (Обзор) / О. Б. Гусев, А. Н. Поддубный, А. А. Прокофьев, И. Н. Ясиевич // *Физика и техника полупроводников*. – 2013. – Т. 47, № 2. – С. 147–167.

69. Nanocrystals for silicon-based light-emitting and memory devices / S. K. Ray, S. Mailap, W. Banerjee, S. Das // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2013. – Vol. 46, No 15. – P. 153001-1–153001-31.

70. Balberg, I. Electrical transport in three-dimensional ensembles of silicon quantum dots / I. Balberg, J. Jedrzejewski, E. Savir // *Physical Review B*. – 2011. – Vol. 83, No. 3. – P. 035318-1–035318-14.

71. Belyakov, V. A. Radiative recombination and migration effects in ensembles of Si nanocrystals: towards controllable nonradiative energy transfer / V. A. Belyakov, V. A. Burdov // *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. – 2011. – Vol. 8, No 3. – P. 365–374.

72. Quantum size effects on exciton states in indirect-gap quantum dots / D. H. Feng, Z. Z. Xu, T. Q. Jia, X. X. Li, S. Q. Gong // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 68, No 3. – P. 035334-1–035334-7.

73. Single-particle states in spherical Si/SiO₂ quantum dots / A. S. Moskalenko, J. Berakdar, A. A. Prokofiev, I. N. Yassievich // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 76, No 8. – P. 085427-1–085427-9.

74. Belyakov, V. A. Anomalous splitting of the hole states in silicon quantum dots with shallow acceptors / V. A. Belyakov, V. A. Burdov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2008. – Vol. 20, No 2. – P. 025213-1–025213-13.

75. Yu, Z. Spin-orbit splitting of the valence bands in silicon determined by means of high-resolution photoconductive spectroscopy / Z. Yu, Y. X. Huang, S. C. Shen // *Physical Review B*. – 1989. – Vol. 39, No 9. – P. 6287–6289.

76. Band offsets of ultrathin high- κ oxide films with Si / E. Bersch, S. Rangan, R. A. Bartynski, E. Garfunkel, E. Vescovo // *Physical Review B*. – 2008 – Vol. 78, No 8. – P. 085114-1–085114-10.

77. Бурдов, В. А. Электронные и дырочные спектры кремниевых квантовых точек / В. А. Бурдов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2002. – Т. 121, № 2. – С. 480–488.

78. Копылов, А. А. «Двухгорбовая» структура и параметры X-минимума в зоне проводимости полупроводников III-V групп / А. А. Копылов // *Физика и техника полупроводников*. – 1982. – Т. 16, № 12. – С. 2141–2144.

79. Hensel, J. C. Cyclotron Resonance in Uniaxially Stressed Silicon. II. Nature of the Covalent Bond / J. C. Hensel, H. Hasegawa, M. Nakayama // *Physical Review*. – 1965. – Vol. 138, No 1A. – P. A225–A238.
80. Ivey, J. L. Ground-state wave function for shallow-donor electrons in silicon. I. Isotropic electron-nuclear-double-resonance hyperfine interactions / J. L. Ivey, R. L. Miehler // *Physical Review B*. – 1975. – Vol. 11, No 2. – P. 822–848.
81. Li, P. Spin-Orbit Symmetries of Conduction Electrons in Silicon / P. Li, H. Dery // *Physical Review Letters*. – 2011. – Vol. 107, No 10. – P. 107203-1–107203-5.
82. Chelikowsky, J. R. Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors / J. R. Chelikowsky, M. L. Cohen // *Physical Review B*. – 1976. – Vol. 14, No 2. – P. 556–582.
83. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики: Учеб. Пособие для вузов. В 10 т. Т. 3. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Под ред. Л. П. Питаевского. – 6-ое изд., исправленное. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 800 с. – ISBN 978-5-9221-0530-9.
84. Sercel, P. C. Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band structure in the multiband envelope-function approximation / P. C. Sercel, K. J. Vahala // *Physical Review B*. – 1990. – Vol. 42, No 6. – P. 3690–3710.
85. Fu, H. Applicability of the $k\cdot p$ method to the electronic structure of quantum dots / H. Fu, L.-W. Wang, A. Zunger // *Physical Review B*. – 1998. – Vol. 57, No 16. – P. 9971–9987.
86. Konakov, A. A. Optical gap of silicon crystallites embedded in various wide-band amorphous matrices: role of environment / A. A. Konakov, V. A. Burdov // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2010. – Vol. 22, No 21. – P. 215301-1–215301-7.
87. Bernevig, B. A. Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System / B. A. Bernevig, J. Orenstein, S.-C. Zhang // *Physical Review Letters*. – 2006. – Vol. 97, No 23. – P. 236601-1–236601-4.
88. Ochiai, Y. Spin-Lattice Relaxation at High Temperatures in Heavily Doped n-type Silicon / Y. Ochiai, E. Matsuura // *Physica status solidi (a)*. – 1978. – Vol. 45, No 2. – P. K101–K104.
89. Electron paramagnetic resonance of conduction-band electrons in silicon / C. F. Young, E. H. Poindexter, G. J. Gerardi, W. L. Warren, D. J. Keeble // *Physical Review B*. – 1997. – Vol. 55, No 24. – P. 16245–16248.
90. Процессы спиновой релаксации электронов проводимости в кремнии с различным изотопным составом / А. В. Сухоруков, А. А. Ежевский, А. В. Гусев, Д. В. Гусейнов, С. А. Попков // *Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского*. – 2010. – №5 (2). – С. 335–338.

91. Electron Spin Resonance in a Silicon Semiconductor / A. M. Portis, A. F. Kip, C. Kittel, W. H. Brattain // *Physical Review*. – 1953. – Vol. 90, No 5. – P. 988–989.
92. Willenbrock, F. K. Paramagnetic Resonance in *N*- and *P*-Type Silicon / F. K. Willenbrock, N. Bloembergen // *Physical Review*. – 1953. – Vol. 91, No. 5. – P. 1281.
93. Wilson, D. K. Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. III. Investigation of Excited States by the Application of Uniaxial Stress and Their Importance in Relaxation Processes / D. K. Wilson, G. Feher // *Physical Review*. – 1961. – Vol. 124, No 4. – P. 1068–1083.
94. Semiconductor spintronics / J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, I. Zutic // *Acta Physica Slovaca*. – 2007. – Vol. 57, No 4–5. – P. 565–907.
95. Temperature dependence of the electron Landé *g* factor in InSb and GaAs / K. L. Litvinenko, L. Nikzad, C. R. Pidgeon, J. Allam, L. F. Cohen, T. Ashley, M. Emeny, W. Zawadzki, B. N. Murdin // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 77, No 3. – P. 033204-1–033204-4.
96. Temperature dependence of the electron spin *g* factor in GaAs / W. Zawadzki, P. Pfeffer, R. Bratschitsch, Z. Chen, S. T. Cundiff, B. N. Murdin, C. R. Pidgeon // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 78, No 24. – P. 245203-1–245203-7.
97. Pfeffer, P. Temperature dependence of the electron spin *g* factor in CdTe and InP / P. Pfeffer, W. Zawadzki // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – Vol. 111, No 8. – P. 083705-1–083705-8.
98. Temperature-dependent electron Landé *g* factor and the interband matrix element of GaAs / J. Hübner, S. Döhrmann, D. Hägele, M. Oestreich // *Physical Review B*. – 2009. – Vol. 79, No 19. – P. 193307-1–193307-4.
99. de Graaf, A. M. Theory of the *g* Shift of Conduction Electrons / A. M. de Graaf, A. W. Overhauser // *Physical Review*. – 1969. – Vol. 180, No 3. – P. 701–706.
100. Isaacson, R. A. Electron Spin Resonance in *n*-type InSb / R. A. Isaacson // *Physical Review*. – 1968. – Vol. 169, No 2. – P. 312–314.
101. Lautenschlager, P. Temperature dependence of band gaps in Si and Ge / P. Lautenschlager, P. B. Allen, M. Cardona // *Physical Review B*. – 1985. – Vol. 31, No 4. – P. 2163–2171.
102. Lautenschlager, P. Phonon-induced lifetime broadenings of electronic states and critical points in Si and Ge / P. Lautenschlager, P. B. Allen, M. Cardona // *Physical Review B*. – 1986. – Vol. 33, No 8. – P. 5501–5511.
103. Green, M. A. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon / M. A. Green // *Journal of Applied Physics*. – 1990. – Vol. 67, No 6. – P. 2944–2954.

104. Mahan, J. D. Many-particle physics / J. D. Mahan. – New York: Plenum, 1990. – 1032 p. – ISBN: 0-308-43423-7.
105. Абрикосов, А. А. Методы квантовой теории поля в статистической физике / А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. – М.: Физматгиз, 1962. – 444 с.
106. Yu, P. Y. Fundamentals of Semiconductors / P. Y. Yu, M. Cardona. – Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2010. – 793 p. – ISBN: 978-3-642-00709-5.
107. Allen, P. B. Solids with thermal or static disorder. I. One-electron properties / P. B Allen // *Physical Review B*. – 1978. – Vol. 18, No 10. – P. 5217–5224.
108. Fischetti, M. V. Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys / M. V. Fischetti, S. E. Laux // *Journal of Applied Physics*. – 1996. – Vol. 80, No 4 – P. 2234–2252.
109. Jacobini, C. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials / C. Jacobini, L. Reggiani // *Reviews of Modern Physics*. – 1983. – Vol. 55, No 3. – P. 645–705.
110. Pop, E. Analytic band Monte Carlo model for electron transport in Si including acoustic and optical phonon dispersion / E. Pop, R. W. Dutton, K. E. Goodson // *Journal of Applied Physics*. – 2004. – Vol. 96, No 9. – P. 4998–5005.
111. Diffusion coefficient of electrons in silicon / R. R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Nava, L. Reggiani, G. Bosman, R. J. J. Zijlstra // *Journal of Applied Physics*. – 1981. – Vol. 52, No 11. – P. 6713–6722.
112. Liu, L. Effects of spin-orbit coupling in Si and Ge / L. Liu // *Physical Review*. – 1962. – Vol. 126, No 4. – P. 1317–1328.
113. Lepine, D. J. Spin Resonance of Localized and Delocalized Electrons in Phosphorus-Doped Silicon between 20 and 30 °K / Lepine D. J. // *Physical Review B*. – 1970. – Vol. 2, No 7. – P. 2429–2439.
114. Altermatt, P. P. A simulation model for the density of states and for incomplete ionization in crystalline silicon. I. Establishing the model in Si:P / P. P. Altermatt, A. Schenk, G. Heiser // *Journal of Applied Physics*. – 2006. – Vol. 100, No 11. – P. 113714-1–113714-10.
115. Consistent set of band parameters for the group-III nitrides AlN, GaN, and InN / P. Rinke, M. Winkelkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, M. Scheffler // *Physical Review B*. – 2008. – Vol. 77, No 7. – P.075202-1 – 075202-15.
116. Vurgaftman, I. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors / I. Vurgaftman, J. R. Meyer // *Journal of Applied Physics*. – 2003. – Vol. 94, No 6. – P. 3675–3696.
117. Cardona, M. Spin-orbit splittings in AlN, GaN and InN / M. Cardona, N. E. Christensen // *Solid State Communications*. – 2000. – Vol. 116, No 8. – P. 421–425.

118. Robertson, J. Band offsets of high K gate oxides on III-V semiconductors / J. Robertson, B. Falabretti // *Journal of Applied Physics*. – 2006. – Vol. 100, No 1. – P. 014100-1–014100-8.

119. Gallium nitride (GaN) / V. Bougrov, M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, A. Zubrilov // *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe* / M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, M. S. Shur (Eds.) – New York: John Wiley & Sons, Inc., 2001. – P. 1–30. ISBN: 978-0-471-35827-5.

120. Золотарев В. М., Морозов В. Н., Смирнова Е. В. Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник / Ленинград: Химия, 1984. – 216 с.

121. Optical studies of the phonons and electrons in gallium nitride / D. D. Manchon, A. S. Barker, P. J. Dean, R. B. Zetterstrom // *Solid State Communications*. – 1970. – Vol. 8, No 15. – P. 1227–1231.

122. Barker, A. S. Infrared Lattice Vibrations and Free-Electron Dispersion in GaN / A. S. Barker, M. Piegems // *Physical Review B*. – 1973. – Vol. 7, No 2. – P. 743–750.

123. Зегря, Г. Г. Механизмы оже-рекомбинации в полупроводниковых квантовых точках / Г. Г. Зегря, Д. М. Самосват // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2007. – Т. 131, № 6. – С. 1090–1106.

124. Особенности формирования и свойства светоизлучающих структур на основе ионно-синтезированных нанокристаллов кремния в матрицах SiO_2 и Al_2O_3 / А. Н. Михайлов, А. И. Белов, А. Б. Костюк, И. Ю. Жаворонков, Д. С. Королев, А. В. Нежданов, А. В. Ершов, Д. В. Гусейнов, Т. А. Грачева, Н. Д. Малыгин, Е. С. Демидов, Д. И. Тетельбаум // *Физика твердого тела*. – 2012. – Т. 54, № 2. – С. 347–359.

125. Свойства наноструктур Al_2O_3 : *nc-Si*, сформированных путем ионной имплантации кремния в сапфир и аморфные пленки оксида алюминия / Д. И. Тетельбаум, А. Н. Михайлов, А. И. Белов, А. В. Ершов, Е. А. Питиримова, С. М. Планкина, В. Н. Смирнов, А. И. Ковалев, R. Turan, S. Yerci, T. G. Finstad, S. Foss // *Физика и техника полупроводников*. – 2009. – Т. 51, № 2. – С. 385–392.

126. Electronic states in spherical GaN nanocrystals embedded in various dielectric matrices: The *k*-*p*-calculations / A. A. Konakov, D. O. Filatov, D. S. Korolev, A. I. Belov, A. N. Mikhaylov, D. I. Tetelbaum, M. Kumar // *AIP Advances*. – 2016. – Vol. 6, No 1. – P. 015007-1–015007-11.

127. Bernevig, B. A. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells / B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S. Zhang // *Science*. – 2006. – Vol. 314, No 5806. – P. 1757–1761.

128. Linder, J. Anomalous finite size effects on surface states in the topological insulator Bi_2Se_3 / J. Linder, T. Yokoyama, A. Sudbo // *Physical Review B*. – 2009. – Vol. 80, No 20. – P. 205401-1–205401-5.

129. Massive Dirac fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator / H.-Z. Lu, W.-Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, S.-Q. Shen // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81, No 11. – P. 115407-1–115407-7.

130. Durnev, M. V. Magnetic field effects on edge and bulk states in topological insulators based on HgTe/CdHgTe quantum wells with strong natural interface inversion asymmetry / M. V. Durnev, S. A. Tarasenko // *Physical Review B*. – 2016. – Vol. 93, No 7. – P. 075434-1–075434-9.

131. Repin, E. V. Surface states in a 3D topological insulator: The role of hexagonal warping and curvature / E. V. Repin, I. S. Burmistrov // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2015. – Т. 148, № 3(9). – С. 584–596.

132. Dresselhaus, G. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures / G. Dresselhaus // *Physical Review*. – 1955. – Vol. 100, No 2. – P. 580–586.

133. Бычков, Ю. А. Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра / Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба // *Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 1984. – Т. 39, № 2. – С. 66–69.