

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

на правах рукописи

Зиновьева Айгуль Фанизовна

СПИНОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МАССИВАХ
ТУННЕЛЬНО-СВЯЗАННЫХ Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

специальность: 01.04.10 — физика полупроводников

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор

Двуреченский А. В.

Новосибирск – 2008

Список обозначений

КТ — квантовая точка

СТМ — сканирующая туннельная микроскопия

ЭПР — электронный парамагнитный резонанс

ЯМР — ядерный магнитный резонанс

СВЧ — сверхвысокая частота

Индексы i, j, k, \dots нумеруют узлы (атомы) кристаллической решётки.

Индексы $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ — тензорные индексы, пробегающие значения x, y, z , или типы орбиталей, пробегающие значения s, p_x, p_y, p_z .

Операторы обозначаются буквами со шляпками: \hat{A}

Для обозначения квантовых состояний используются бра- и кет-символы: $|\psi\rangle, \langle\psi|$.

Координатные оси x, y, z выбраны в направлениях $\langle 100 \rangle$, причём ось z совпадает с осью симметрии Ge пирамиды (направлением роста); оси x и y лежат в плоскости Ge слоя.

(При рассмотрении главных значений g -фактора используется другая система координат, в которой оси x, y, z совпадают с главными осями g -тензора.)

$e_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор

E_z — величина зеемановского расщепления в магнитном поле

μ_B — магнетон Бора

g — фактор Ланде

\mathbf{H} — магнитное поле

$|\psi\rangle, |\chi\rangle$ — вектора состояний, принадлежащие двукратно вырожденному уровню

\hat{l} — оператор орбитального момента

\hat{s} — оператор спина

$\hat{\mu}$ — оператор магнитного момента

\hat{H} — гамильтониан электрона в нулевом магнитном поле

$\hat{H}_{\text{магн}}$ — оператор взаимодействия электрона с внешним магнитным полем

\mathbf{n} — единичный вектор в направлении магнитного поля

$g_{\alpha\beta}^2$ — тензор квадрата g -фактора

$|\varphi_{i\alpha}\rangle$ — атомная орбиталь α -го типа, принадлежащая i -му атому

$c_{i\alpha}$ — коэффициент, с которым орбиталь $|\varphi_{i\alpha}\rangle$ входит в волновую функцию

$\hat{\mathbf{k}}$ — оператор волнового вектора

\mathbf{A} — векторный потенциал

\hat{H}_{spin} — часть оператора взаимодействия с магнитным полем, связанная с эффективным спином

$\hat{\mathbf{J}}$ — оператор углового момента

J, J_z — собственные значения углового момента и его проекции на ось z

Символ $|J, J_z\rangle$ обозначает состояние со значением углового момента J и его проекции J_z

$\hat{\mathbf{m}}_{\text{orb}}$ — часть магнитного момента, связанная с огибающей волновой функцией

$\hat{\mathbf{m}}_{\text{spin}}$ — часть магнитного момента, связанная с эффективным спином

\hat{P} — проекционный оператор

$\hat{\sigma}(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ — матрицы Паули

k, q — параметры Латтинжера

g_{so} — g -фактор дырки в отщеплённой зоне

g_c — g -фактор электрона в Γ -долине зоны проводимости

$\hat{\mathbf{r}}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ — оператор радиус-вектора электрона

$\hat{\mathbf{R}}(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ — оператор радиус-вектора атомной орбитали

$\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса

$\hat{\mathbf{v}}$ — оператор скорости

m — масса свободного электрона

g_x, g_y, g_z — главные значения g -фактора

l — латеральный размер Ge нанокластера (длина стороны основания пирамиды)

w — вероятность индуцированного перехода в единицу времени

$|i\rangle, |f\rangle$ — начальное и конечное состояния, соответствующие нижнему и верхнему уровням дублета

\mathbf{b} — амплитуда магнитного поля электромагнитной волны

g_θ — значение g -фактора при магнитном поле, направленном под углом θ к оси x (в плоскости xz)

$\tilde{\mathbf{b}}, \tilde{\mathbf{H}}$ — вспомогательные вектора, компоненты которых равны $(g_x b_x, g_y b_y, g_z b_z)$

и $(g_x H_x, g_y H_y, g_z H_z)$, соответственно

$\hat{a}_{i\alpha}^+, \hat{a}_{i\alpha}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на α -й орбитали i -го атома

$\epsilon_{i\alpha}$ — энергия α -й орбитали i -го атома

I — энергетический интеграл перекрытия

$U_e(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия электрона

$E_c^{Si}, E_c^{Ge}, E_v^{Si}, E_v^{Ge}$ — энергии краёв зоны проводимости и валентной зоны в недеформированных Si и Ge

$x(\mathbf{r})$ — состав среды в точке с радиус-вектором \mathbf{r} (0 для Si, 1 для Ge)

$\epsilon(\mathbf{r})$ — след тензора деформации $(\epsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \epsilon_{yy}(\mathbf{r}) + \epsilon_{zz}(\mathbf{r}))$

Ξ_d, Ξ_u — константы деформационного потенциала для Δ -долины зоны проводимости

a_v, b — константы деформационного потенциала для валентной зоны

m_{xy}^* , m_z^* — эффективные массы в плоскости xu и в направлении оси z

$V_i(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия i -й частицы в электрическом поле, создаваемом
распределёнными зарядами остальных частиц

M_q — матричный элемент оператора взаимодействия с фононами

ρ — плотность

\mathbf{e}_q — вектор поляризации фонона

\mathbf{q} — волновой вектор фонона.

Γ — вероятность перехода под действием некоторого возмущения

T_1 — время релаксации продольной компоненты спина (время установления равновесной
заселённости уровней)

T_2 — время релаксации поперечной компоненты спина (время декогерентизации)

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	8
ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.....	14
§ 1.1. Спин-орбитальное взаимодействие и g -фактор в низкоразмерных системах	14
§ 1.2. Предложения по использованию спиновой степени свободы.....	20
§ 1.3. Исследование спиновой релаксации в полупроводниковых наноструктурах	31
ГЛАВА 2. G -ФАКТОР ДЫРОК В Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ	41
§ 2.1. Описание объекта исследования и постановка задачи	41
§ 2.2. Метод сильной связи.....	42
§ 2.3. Метод вычисления g -фактора	56
§ 2.4. g -фактор дырок в Ge/Si квантовых точках.....	69
§ 2.5. Зависимость g -фактора от размера Ge/Si квантовой точки	75
§ 2.6. Обсуждение экспериментальных возможностей измерения g -фактора дырок в Ge/Si квантовых точках	80
Выводы к главе 2	90
ГЛАВА 3. СПИНОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ДЫРОК В МАССИВАХ Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧЕК	91
§ 3.1. Постановка задачи.....	91
§ 3.2. Спиновая релаксация при туннелировании между квантовыми точками	92
3.2.1. Метод вычисления	92
3.2.2. Вероятность переворота спина при резонансном туннелировании.....	97
§ 3.3. Спиновая релаксация дырок в Ge/Si квантовой точке за счёт взаимодействия с фононами.....	112
§ 3.4. Спиновый транспорт в двумерных массивах Ge/Si квантовых точек.....	123
Выводы к главе 3	137

ГЛАВА 4. ЭЛЕКТРОНЫ В СИСТЕМЕ С Ge/Si КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ	138
§ 4.1. Постановка задачи.....	138
§ 4.2. Экспериментальные результаты исследований методом ЭПР электронов, локализованных вблизи Ge/Si квантовых точек.....	140
§ 4.3. Обсуждение полученных результатов.....	149
4.3.1 g-фактор электронов, локализованных вблизи Ge/Si квантовых точек	149
4.3.2. Угловая зависимость ширины ЭПР-линии.....	156
Выводы к главе 4	160
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.....	161
Приложение А. Спиновая релаксация за счёт флуктуаций электронного потенциала.....	163
Приложение Б. g-фактор электрона, локализованного вблизи вершины Ge/Si квантовой точки.....	170
Заключение.....	197
Литература	201

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа лежит в русле исследований спиновых явлений в наноструктурах, которые в настоящее время рассматриваются как одно из актуальных направлений современной физики твёрдого тела. Это направление получило отдельное название “спинтроника” и связано с потенциальным применением спиновой степени свободы для создания различных приборов [1]. Создание низкоразмерных наноструктур резко стимулировало исследование спиновой динамики в полупроводниках в последние два десятилетия. Особое внимание уделяется структурам с квантовыми точками (КТ), в которых контроль и управление спиновым состоянием легче осуществить, чем в других спиновых системах, поскольку движение носителей в них ограничено в трех направлениях.

Для управления спином носителя необходимо знание особенностей спин-орбитального взаимодействия в системе, так как именно спин-орбитальное взаимодействие позволяет осуществить связь между поступательным движением квазичастиц и их спиновой степенью свободы. Это дает возможность управлять спином с помощью света или электрического поля или тока. Основным параметром, несущим информацию о спин-орбитальном взаимодействии является g -фактор. Фактор Ланде спинового расщепления свободного электрона $g \approx 2$ описывает взаимодействие электронных состояний $\pm 1/2$ с внешним магнитным полем. В твёрдых телах взаимодействие с потенциалом решетки приводит к существенному отличию g -фактора от g -фактора свободного электрона. При понижении размерности системы от трёхмерного (3D) случая к двумерному (2D) и далее, эффекты размерного квантования приводят к новым изменениям g -фактора носителей заряда. Поскольку квантовые точки являются предельным случаем размерного квантования, то в них наиболее сильно проявляются эти эффекты. Фактор Ланде несёт в себе численную информацию об изменении зонной структуры полупроводника при понижении размерности. Поэтому его исследование является актуальным и с фундаментальной точки зрения.

Низкоразмерные системы на основе Ge/Si являются перспективными для реализации идей спинтроники и квантовых вычислений. Величина спин-орбитального взаимодействия в Si мала, и время спиновой релаксации соответственно велико по сравнению с другими материалами. Время спиновой релаксации T_1 в Si составляет 1-10 часов при гелиевых температурах [2,3], а время дефазировки T_2 составляет миллисекунды [4]. В Ge при тех же температурах времена T_1 , T_2 одного порядка и составляют миллисекунды [5]. Тогда как в материалах группы A_3B_5 время спиновой релаксации на несколько порядков меньше и лежит в наносекундном диапазоне [6]. В квантовых точках Ge/Si электрон главным образом локализован в кремнии [7], что, несомненно, привлекательно для практического использования в элементарной ячейке квантового компьютера. Кроме того, особенности структуры с Ge/Si КТ увеличивают время релаксации спина из-за пространственного разделения дырки и электрона (это приводит к ослаблению релаксации спина электрона за счёт обменного взаимодействия с дыркой).

Недавние исследования показали, что с понижением размерности системы время спиновой релаксации увеличивается [8,9]. Понижение размерности вплоть до нульмерных объектов приводит к увеличению времени спиновой релаксации на несколько порядков, что было продемонстрировано на системе A_3B_5 [10]. На данный момент предложены схемы реализаций квантовых вычислений на квантовых точках [11] и такие приборы как спиновые транзисторы, спиновые фильтры на квантовых точках [12].

Исследование спинового транспорта в полупроводниковых наноструктурах является актуальной задачей с точки зрения обеспечения передачи спиновой информации между элементами управления и считывания. Плотные массивы туннельно-связанных Ge/Si квантовых точек могут быть рассмотрены в качестве такого канала передачи спиновой информации. Перенос спина посредством туннелирования между квантовыми точками является наиболее оптимальным способом, поскольку в локализованном состоянии спин может сохраняться наиболее длительное время, и исключается возможность потери

информации при рассеянии свободных носителей заряда. Однако встаёт вопрос о влиянии самого процесса туннелирования на ориентацию спина, поскольку переворот спина может произойти и при туннелировании между двумя квантовыми точками за счёт спин-орбитального взаимодействия. Решение этого вопроса позволяет получить дополнительное знание особенностей спин-орбитального взаимодействия в системе с Ge/Si квантовыми точками, что может дать новые возможности для управления спинами носителей заряда. Второй вопрос – это возможная потеря информации при конечных температурах за счёт взаимодействия с окружением как для локализованного носителя внутри квантовой точки, так и при туннелировании между точками. Исследование этих двух вопросов позволит получить наиболее полное представление о спиновом транспорте в плотных массивах Ge/Si квантовых точек.

Диссертационная работа посвящена изучению процессов спиновой релаксации в плотных массивах Ge/Si квантовых точек в магнитном поле.

Целью настоящей диссертационной работы является установление основных механизмов спиновой релаксации в изолированных квантовых точках и при транспорте в плотных массивах Ge/Si туннельно-связанных квантовых точек в магнитном поле.

Для достижения указанной цели решались следующие **задачи**:

- 1) Разработать теоретический подход и определить энергетический спектр и волновые функции носителей заряда в Ge/Si квантовых точках в магнитном поле.
- 2) Разработать теоретический подход и определить время спиновой релаксации носителей заряда в массивах Ge/ Si квантовых точек.
- 3) Установить основные механизмы спиновой релаксации носителей заряда в массивах туннельно-связанных Ge/ Si квантовых точек.
- 4) Экспериментально методом ЭПР установить основные характеристики спиновых состояний электронов в массиве туннельно-связанных квантовых точек Ge в Si.

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

- 1) Определён энергетический спектр и волновые функции дырок, локализованных в Ge/Si квантовых точках, в магнитном поле.
- 2) Обнаружен новый ЭПР-сигнал в структурах с Ge/Si квантовыми точками с аксиально-симметричным g -фактором ($g_{\parallel}=1.9995$, $g_{\perp}=1.9984$) и анизотропной шириной линии.
- 3) Установлены вклады различных механизмов в процессы спиновой релаксации в массивах Ge/Si квантовых точек и получены характерные времена для основных механизмов релаксации в массивах Ge/Si квантовых точек.
- 4) Показано, что основным механизмом спиновой релаксации в плотных массивах туннельно-связанных Ge/Si квантовых точек (плотность $\sim 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) является прецессионный механизм потери спиновой ориентации при туннелировании носителей заряда между квантовыми точками. Прецессия происходит вокруг направления перпендикулярного направлению туннелирования.
- 5) Установлено, что при туннелировании носителей заряда между Ge/Si квантовыми точками возникает эффективное магнитное поле, связанное с отсутствием зеркальной симметрии квантовых точек относительно плоскости роста (100).

Практическая ценность

1) Разработанный метод вычисления g -фактора носителей заряда, локализованных в квантовых точках, может быть использован для расчёта зеемановского расщепления и в других системах. Метод не имеет ограничений снизу на размер квантового объекта вплоть до одного атома.

2) Экспериментальное подтверждение возникновения эффективного магнитного поля в плоскости массива КТ при туннелировании носителей между Ge/Si квантовыми точками, составит основу для развития новых методов управления вращением спинов носителей заряда в низкоразмерных структурах.

3) Полученные времена спиновой релаксации и значения g -факторов электронов и дырок, локализованных в структурах с Ge/Si квантовыми точками, могут быть использованы при разработке спиновых приборов, основанных на Ge/Si квантовых точках.

4) Отсутствие зависимости g -фактора электронов, локализованных в массивах Ge/Si квантовых точек, от энергии связи в пределах ~ 20 мэВ открывает возможности для проведения элементарных однокубитовых операций в ансамбле Ge/Si квантовых точек с помощью импульсов СВЧ определенной длительности.

Личный вклад автора в диссертационную работу заключался в постановке и проведении экспериментов, в обсуждении полученных результатов, в развитии теоретических подходов, создании математических моделей и проведении модельных расчётов.

На защиту выносятся следующие положения:

- 1) Основным механизмом потери спиновой ориентации в плотных массивах туннельно-связанных Ge/Si квантовых точек является прецессионный механизм, связанный с отсутствием зеркальной симметрии квантовых точек относительно плоскости роста массива квантовых точек.
- 2) В спектре одномерного кристалла, узлами которого являются Ge/Si квантовые точки, присутствует спиновое расщепление. Для носителя заряда, туннелирующего между квантовыми точками, это эквивалентно существованию эффективного магнитного поля, лежащего в плоскости (100) и перпендикулярного направлению туннелирования.
- 3) Вероятность переворота спина при резонансном туннелировании дырок между Ge/Si квантовыми точками определяется величиной эффективного магнитного поля, зависящего от геометрии квантовой точки (от отношения высоты квантовой точки h к размеру её основания l). С увеличением отношения h/l вероятность переворота увеличивается.

- 4) Новый ЭПР-сигнал с аксиально-симметричным g -фактором ($g_{\parallel}=1.9995$, $g_{\perp}=1.9984$) и анизотропной шириной линии, обнаруженный в гетероструктурах с Ge/Si квантовыми точками, связан с электронами, локализованными в асимметричных потенциальных ямах, образованных за счёт деформаций в Si вблизи вершин Ge квантовых точек.
- 5) Экспериментально обнаруженная анизотропия ширины линии ЭПР-сигнала (минимальное значение ширины линии 0.8 Гс наблюдается в магнитном поле, направленном вдоль оси роста [001], а максимальное значение, в 4 раза больше, – в перпендикулярном направлении) связана с анизотропией процессов спиновой релаксации в двумерных массивах Ge/Si квантовых точек и служит подтверждением существования в плоскости роста (100) эффективного магнитного поля, аналогичного полю Бычкова-Рашбы.

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Спин орбитальное взаимодействие и g фактор в низко-размерных системах.

К настоящему времени накоплен обширный теоретический и экспериментальный материал по энергетическому спектру, оптическим и электрическим свойствам носителей в квантовых точках [13-15]. Вопрос о магнитных свойствах квантовых точек достаточно хорошо освещен для гетероэпитаксиальных точек I типа, с одновременным электронным и дырочным квантованием внутри точки, и для точек, сформированных с помощью затворов на основе 2D структур. Существует несколько традиционных экспериментальных способов исследования магнитных свойств носителей в квантовых точках: оптический спиновый резонанс, транспорт в магнитном поле, магнитно-туннельная спектроскопия, фотолюминесценция в магнитном поле и т. д. [16-20]. Основная часть результатов получена для квантовых точек, сформированных в системе A_3B_5 и A_2B_6 . Такое положение вещей, с одной стороны, объясняется исторически сложившимся интересом к оптически активным материалам как к перспективным для создания лазеров и фотоприемников, а с другой стороны, возможностью с помощью циркулярно-поляризованного излучения создавать и изучать спиновую ориентацию носителей заряда в таких полупроводниках.

Любое потенциальное применение спиновой степени свободы неизбежно предполагает создание определенного спинового состояния, управление его свойствами, а также сохранение этого спинового состояния в течение некоторого промежутка времени. Для успешного управления спином необходимо знать такие фундаментальные спиновые свойства, как эффективный g-фактор, который определяет продолжительность π -импульса для переворота спина, и время спиновой релаксации.

Спин-орбитальное взаимодействие даёт возможность воздействовать на спин не только с помощью внешнего магнитного поля, но и с помощью света, электрического поля или тока. Изменяя с помощью электрических воздействий поступательное движение квазичастиц можно управлять вращением их спинов. В связи с этим становится актуальным

поиск путей создания низкоразмерных систем с заранее заданным видом спин-орбитального взаимодействия, позволяющим управлять спинами носителей. Далее дадим краткое описание физической сути спин-орбитального взаимодействия.

Спин-орбитальное взаимодействие – это взаимодействие магнитных моментов, связанных со спиновыми и орбитальными моментами количества движения электронов и ядер в квантовой системе – атоме, молекуле, кристалле. Можно рассмотреть его как взаимодействие спина электрона с магнитным полем, которое возникает как результат движения носителя заряда в некотором электрическом поле. Так, электрическое поле \mathbf{E} от ядер в кристалле преобразуется в магнитное поле $\mathbf{H} = (1/mc)\mathbf{E} \times \mathbf{p}$ в результате движения электронов со скоростью (p/m) относительно ядер. Гамильтониан для атома, включающий эти взаимодействия, но пренебрегающий спин-спиновым взаимодействием имеет вид [21]:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i \neq j} \sum_{r_{ij}} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_i \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \frac{Ze^2}{r_i^3} \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i - \sum_{i \neq j} \sum_{r_{ij}} \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \frac{1}{r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij} \times (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_j) \times \boldsymbol{\sigma}_i - \\ & - \sum_{i \neq j} \sum_{r_{ij}} \frac{e^2 \hbar}{4m^2 c^2} \frac{1}{r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i \times \boldsymbol{\sigma}_i, \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

где Z - атомный номер, i, j индексы, нумерующие электроны; r_i расстояние от ядра; $r_{ij} = r_i - r_j$, $\boldsymbol{\sigma}_i$ - матрицы Паули. Первые три члена включают кулоновскую и кинетическую энергию; четвертый член – спин-орбитальное взаимодействие с ядром; пятый член это сумма электрон-электронного спин-орбитального взаимодействия, последний член – взаимодействие с магнитными полями, создаваемыми другими электронами при их движении.

Для одиночного электрона в поле заряда Ze , спин-орбитальная энергия может быть записана, как:

$$\hat{H}^{so} = \frac{1}{4} Z^2 \alpha^2 \left(\frac{e^2 a_0^2}{r^3} \right) \left(\frac{\mathbf{r} \times \mathbf{p}}{\hbar} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (1.1.2)$$

где a_0 – Боровский радиус, $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137$ - постоянная тонкой структуры.

Спин-орбитальное взаимодействие в твердом теле приводит к ряду интересных явлений, таких как спиновая ориентация электрическим током или полем [22, 23], или анизотропия спиновой релаксации, обнаруженная в двумерных системах. Для существования этих явлений необходимо спиновое расщепление энергетического спектра носителей в отсутствие внешнего магнитного поля, то есть два спиновых состояния с одним и тем же волновым вектором \mathbf{k} должны иметь разную энергию. Такое возможно при отсутствии в системе центра инверсии. В двумерных системах это может быть связано либо со структурной асимметрией самой квантовой ямы, либо с отсутствием объемной симметрией в материалах, из которых выращена гетероструктура. Структурная асимметрия (structure-inversion asymmetry) может быть вызвана различием верхней и нижней гетерограниц квантовой ямы по составу или шероховатости, приложением электрического поля поперек плоскости структуры, или несимметричным легированием. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия в квантовых ямах со структурной асимметрией имеет вид:

$$\hat{H}_{SIA}(\mathbf{k}) = \alpha_{SIA}(\hat{\sigma}_x k_y - \hat{\sigma}_y k_x) = \alpha_{SIA}(\hat{\sigma} \times \mathbf{k})_z. \quad (1.1.3)$$

Этот вид гамильтониана впервые предложил Рашба для объемных полупроводников со структурой вюрцита [24], а затем в работах [25, 26, 27, 28] он был отнесен и к двумерным системам со структурной асимметрией.

Отсутствие центра инверсии в кристаллической структуре объемного полупроводника приводит к другому виду гамильтониана спин-орбитального взаимодействия, так называемому гамильтониану Дрессельхауза. Однако его вид зависит от того, вдоль какого кристаллографического направления выращена квантовая яма. Для объемного полупроводника A_3B_5 с симметрией T_d спин-орбитальное взаимодействие имеет вид [29]:

$$\hat{H}_{SO}(\mathbf{k}) = \gamma(\hat{\sigma}_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \hat{\sigma}_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \hat{\sigma}_z k_z (k_x^2 - k_y^2)), \quad (1.1.4)$$

где γ – постоянная, $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, $z \parallel [001]$ – кубические оси кристалла.

Для квантовой ямы, выращенной вдоль оси $z \parallel [001]$, гамильтониан можно привести к виду [30]:

$$\hat{H}_{BLA}(\mathbf{k}) = \beta(\hat{\sigma}_x k_x - \hat{\sigma}_y k_y), \text{ где } \beta = -\gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle \quad (1.1.5)$$

Здесь было выполнено усреднение выражения (1.4) по адиабатически-быстрому движению по оси роста с учётом $\langle \hat{k}_z \rangle = 0$, $\langle \hat{k}_z^2 \rangle \neq 0$.

Оба типа слагаемых (1.1.3) и (1.1.5) позволяют организовывать спиновые токи в двумерных квантовых ямах, а (1.1.3) управлять спиновой ориентацией двумерных электронов приложением внешнего электрического поля.

g-фактор носителей заряда в полупроводниковых наноструктурах

g-фактор - это величина, количественно описывающая зеемановское расщепление энергетического уровня в магнитном поле. По другому его называют гиромангнитным множителем, поскольку он равен отношению магнитного момента электрона, взятому в Боровских единицах к его угловому моменту в единицах \hbar .

g-фактор свободного электрона (в вакууме) равен 2.0023. Эта величина складывается из величины $g_0=2$, которая следует из уравнения Дирака [31, § 33], и поправки $\alpha/\pi = 0.0023$, возникающей из-за нулевых колебаний электромагнитного поля [31, § 118]. Если электрон находится во внешнем потенциале (например, электрон в кристалле [21] или система электронов в атоме [32, § 113]), то его g-фактор, вообще говоря, отличается от значения для свободного электрона и может зависеть от направления магнитного поля. Кроме того, g-фактор будет разным в различных состояниях частицы (например, в разных долинах зоны проводимости и валентной зоны полупроводника).

g-фактор электронов проводимости в твердом теле определяется в основном спин-орбитальным расщеплением валентной зоны и близких оболочек, лежащих под этими валентными состояниями. В материалах с большим спин-орбитальным расщеплением наблюдается сильное отличие значения g-фактора от $g=2.0023$, например, в случае InSb

величина g -фактора достигает 50. Важную роль играет и ширина запрещенной зоны материала: в узкозонных материалах g -фактор может достигать аномально больших значений, например в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, g -фактор возрастает до 2500 при $x=0.136$ [33].

Эффекты размерного квантования значительно влияют на величину g -фактора носителей заряда в полупроводниковых наноструктурах. Например, для электронов в низкоразмерных системах квантование приводит к существенному изменению значения g -фактора [34] и его сильной анизотропии [35]. На сегодня существуют работы, в которых развиты последовательные $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ теории, позволяющие рассчитать g -фактор электронов в квантовых ямах и сверхрешётках [35] и квантовых точках [36]. Для дырок же эффект Зеемана исследовался теоретически и экспериментально для структур с квантовыми ямами [37-40]. Обычно экспериментальное значение дырочного g -фактора в квантовых точках является результатом косвенного измерения. Как правило, исследуется спектр фотолюминесценции в магнитном поле и из экспериментально найденного значения g -фактора экситона (g_{ex}) и g -фактора электрона (g_e), пользуясь соотношением $g_{ex}=g_{hh}\pm g_e$ ("-" для оптически активных экситонов, "+" для оптически неактивных экситонов), вычисляется g -фактор дырки. Для квантовых точек теоретического исследования эффекта Зеемана для дырочных состояний на момент проведения данной работы не существовало.

Приведем принципиальные отличия между двумерным случаем квантовых ям и случаем квантовых точек, которые должны привести к изменению g -фактора. Случай достаточно широких квантовых ям в магнитных полях, малых по сравнению с энергией квантования (или с энергией расщепления зон, вызванного упругими напряжениями), можно рассматривать в приближении объёмного полупроводника и получить значения g -факторов дырочных подзон прямо из точной формы 8×8 $\mathbf{k}\mathbf{p}$ гамильтониана: для тяжёлой дырки $g_{\parallel}=6k$, $g_{\perp}=0$, для лёгкой дырки $g_{\parallel}=2k$, $g_{\perp}=4k$ (здесь параметр q опущен из-за малости, в противном случае $g_{\perp}\neq 0$ для тяжёлой дырки, а для остальных компонент существуют поправки линейные по q), k , q -параметры Латтинжера [41]. В более узких квантовых ямах возрастает

неопределённость по импульсу k_z , что приводит к модификации g -фактора лёгкой дырки за счет подмешивания состояний спин-отщепленной зоны и зоны проводимости (здесь принято, что Z -направление роста) [41]. Фактор Ланде тяжёлой дырки на дне зоны практически не меняется, поскольку зона тяжёлых дырок с ближайшими зонами не взаимодействует. В достаточно узких ямах меняется и g -фактор лёгкой дырки и g -фактор тяжёлой дырки за счёт влияния барьеров, формирующих квантовую яму [37].

В случае квантовых точек к существенной перенормировке g -фактора дырочных состояний должно привести появление квантующего потенциала не только в направлении роста, как в случае $2D$ структур, но и столь же сильного квантования в латеральном направлении. Это приводит к неопределенности по k_x , k_y и в результате к сильному перемешиванию зон лёгких и тяжёлых дырок и спин-отщеплённой зоны. При теоретическом исследовании эффекта Зеемана в двумерных системах, как правило, это перемешивание не учитывается, так как рассматриваются состояния на дне зоны, где $k_x, k_y=0$.

В квантовых точках, созданных на основе напряжённых гетероструктур, к значительному изменению g -фактора должна привести неоднородность деформаций внутри квантовых точек. Если сравнивать квантовую точку и квантовую яму, выращенные вдоль направления $[001]$, то в последней будут отсутствовать деформации сдвига ϵ_{xy} , ϵ_{xz} , ϵ_{yz} , приводящие к перемешиванию состояний лёгкой и тяжёлой дырок [41]. В квантовой точке такие деформации присутствуют, и это может вызвать дополнительные изменения g -фактора.

Итак, в случае квантовых точек квантование во всех трёх направлениях и неоднородность деформаций должны приводить к значительному изменению g -фактора дырочных состояний за счёт перемешивания состояний разных энергетических зон. Эти эффекты должны ярко проявиться в случае Ge/Si квантовых точек, полученных в результате самоорганизации при гетероэпитаксии.

1.2. Предложения по использованию спиновой степени свободы

На сегодняшний день существует много предложений приборов, использующих спиновую степень свободы. Для их конкретной реализации необходимо знание таких параметров как g -фактор носителей, особенности энергетического спектра в магнитном поле и вид спин-орбитального взаимодействия. Первым прибором, использующим особенности спин-орбитального взаимодействия для управления носителями заряда, был спиновый полевой транзистор [42]. В таком устройстве носители (электроны с разными спинами) инжектируются ("впрыскиваются") из магнитного истока (это может быть ферромагнитный металл либо магнитный полупроводник) к стоку, намагниченному в том же направлении, что и исток, через полупроводниковый канал. Если к затвору не приложено электрическое напряжение, то поляризованные носители доходят до стока и тем самым замыкают электрическую цепь, а такое состояние транзистора называют "открытым ключом". Если на затвор подать малое напряжение, то спин-орбитальное взаимодействие в такой структуре обеспечит взаимодействие с электрическим полем, что приведет к прецессии спинов в эффективном магнитном поле (см. рис. 1.2.1) . При определенном напряжении спины развернутся в сторону, противоположную намагниченности стока. Такое состояние соответствует "закрытому ключу", так как спины не проходят через сток. Два состояния спинового транзистора - открытый и закрытый - можно сопоставить с логическим "0" и "1" бита информации. Но такой транзистор может работать только в баллистическом режиме, поскольку существует жесткая связь между квазиимпульсом и спином. При первом же акте рассеяния квазиимпульса направление спина теряется. Недавно был предложен новый вариант небаллистического спинового транзистора [43]. В данном варианте к взаимодействию Рашбы подключается взаимодействие Дрессельхауза [29]. Константы взаимодействий подбираются таким образом, что существует такое спиновое состояние, которое сохраняется при рассеянии квазиимпульса.

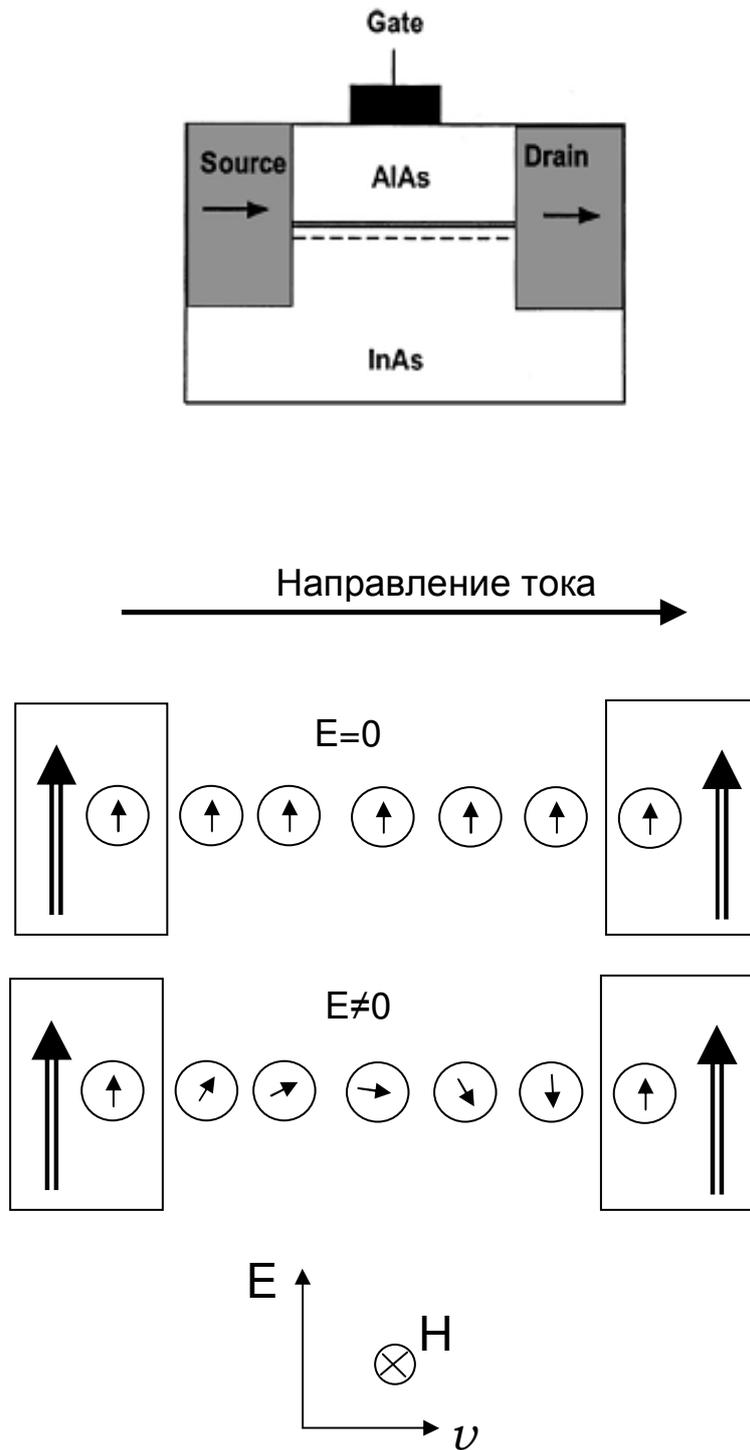


Рис. 1.2.1. Схематическое изображение спинового полевого транзистора. Здесь E - электрическое поле, приложенное к затвору, v - скорость электрона, H - эффективное магнитное поле, возникающее в системе отсчета движущегося электрона.

Наиболее интересным и труднореализуемым предложением использования спиновой степени свободы является квантовый компьютер. Основная идея этого предложения заключается в использовании двухуровневых квантовых систем, одно из состояний которых может служить 0, а другое 1 (частица со спином $\frac{1}{2}$, или двухуровневый атом), т. е. квантовым битом информации или кубитом. Обязательным является использование так называемых запутанных состояний (по-английски entangled state). Для двухчастичной системы это особое квантово-механическое состояние типа: $|\Phi_1\rangle|\Psi_1\rangle + |\Phi_2\rangle|\Psi_2\rangle$. Когда система находится в состоянии такого вида, нельзя утверждать, что какая-либо из подсистем находится в своем определенном состоянии, но можно получить информацию об одной из подсистем, производя эксперименты над другой. То есть, как бы далеко вы не разнесли две части основной системы, они все равно будут являться носителями информации о целом, и в частности друг о друге. Использование таких запутанных состояний и даёт выигрыш при использовании квантового компьютера.

На данный момент уже предложено огромное количество различных моделей квантового компьютера, и их описание могло бы составить целую монографию. Но наиболее перспективными представляются твердотельные варианты реализации на ядерных и электронных спинах доноров, квантовых точках и сверхпроводниковых элементах.

Рассмотрим наиболее известные твердотельные варианты реализации квантового компьютера, их ещё называют полупроводниковыми:

- 1) предложенную Кейном модель ЯМР-компьютера на атомах фосфора P^{31} в кремниевой матрице [44],
- 2) предложенную Ди Винченцо и соавторами модель квантового компьютера основанную на зеемановских переходах электронов атомов P^{31} в гетероструктурах Si/Ge [5],
- 3) предложенную Даниэлем Лоссом и Дэвидом Ди Винченцо модель квантового компьютера с квантовыми точками [10].

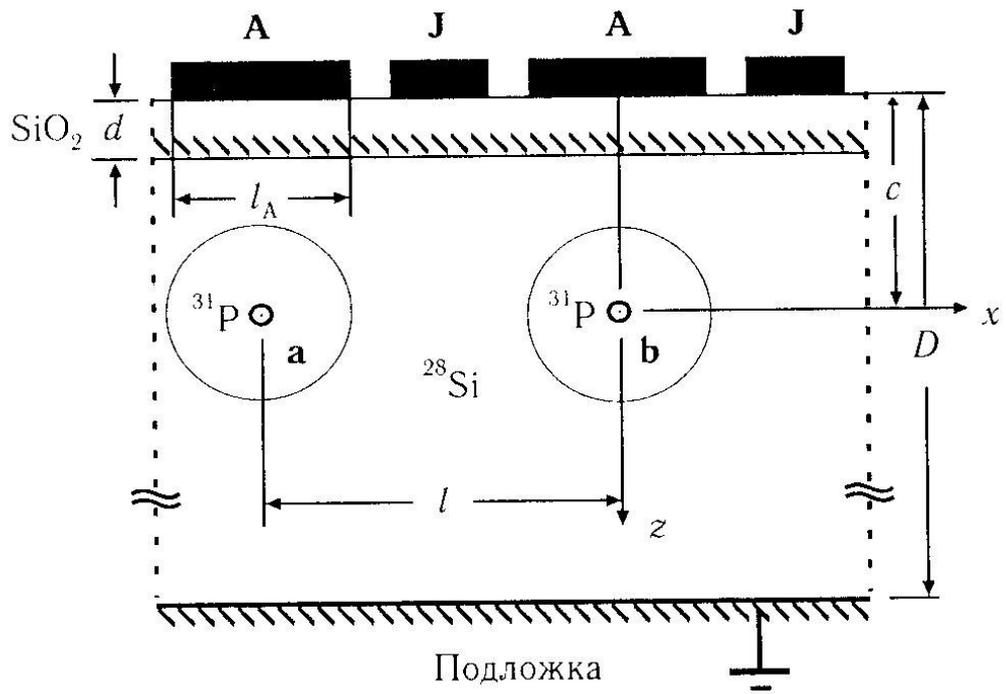


Рис. 1.2.2. Схематическое изображение двух ячеек полупроводниковой структуры, предложенной в модели Кейна.

Модель Кейна. В 1998 году Б. Кейном был предложен твердотельный вариант квантового компьютера на ядерных спинах атомов P^{31} в Si [44]. Основой этого варианта является кремниевая МОП-структура, где в тонкий слой вблизи поверхности бесспинового изотопа кремния Si^{28} внедрены донорные атомы стабильного изотопа фосфора P^{31} , замещающие атомы кремния в узлах кристаллической решетки. Взаимодействие между соседними ядерными спинами осуществляется через сверхтонкое взаимодействие с донорными электронами за счёт частичного перекрытия электронных волновых функций.

Над каждым донором помещается затвор А, управляющий кубитом, между ними - затвор J, управляющий взаимодействием между двумя кубитами (см. рис.1.2.2). Расстояние между донорами l , а вместе с ним и период полупроводниковой структуры выбирается достаточно малым для того, чтобы постоянная J эффективного обменного взаимодействия электронов двух соседних водородоподобных донорных атомов a и b $J(\hat{S}_a \hat{S}_b)$, обусловленного частичным перекрытием их электронных волновых функций в соответствующем направлении, имела значение наиболее чувствительное к воздействию на него полем затвора J. В полях $B=2$ Тл она составляет $l \sim 10-20$ нм. Если вместо кремния использовать германий, то период структуры немного вырастет и составит 25-50 нм. Можно ещё более увеличить расстояние между донорами, если использовать для передачи информации о когерентном состоянии одного ядерного спина к другому следующую схему [45]. Сначала от ядерного спина посредством операции SWAP (операция обмена между кубитами) информация о состоянии ядерного спина передается через сверхтонкое взаимодействие электронному спину, связанному с донором. Затем с помощью цепочки затворов, часть из которых находится над свободными от доноров областями, путем приложения к ним электрического потенциала производится ионизация донора и переход электрона в приповерхностный двумерный (или одномерный) проводящий канал. Этот канал должен быть полностью свободен от зарядовых ловушек. Характерная длина, на которой спиновые состояния подвижных электронов теряют когерентность, при низких температурах достаточно велика

(экспериментально было показано, что в GaAs при низких температурах она превышает 100 мкм [46]). Поэтому электроны могут без потери спиновой когерентности достигнуть затвора над вторым удалённым донором. Напряжение на затворе зануляется и квантовая информация с помощью второй операции SWAP передается от электронного спина к ядерному спину второго донора.

Первым достоинством является данной модели является то, что ядерные спины доноров хорошо изолированы от окружения и при низких температурах ($T < 4\text{K}$ и $B < 1\text{Tл}$) имеют времена спин-решеточной релаксации измеряемые многими часами и большое время декогерентизации.

Вторым достоинством является то, что можно получать структуры с очень большим числом кубитов в отличие от спиновых систем органических молекул, которые ограничены максимум ~30 кубитами;

Третьим достоинством является то, что в данной модели предлагается использовать гомоядерную систему ядерных спинов одинаковых доноров с индивидуальной настройкой резонансной частоты отдельных спинов-кубитов, индивидуальным измерением и инициализацией их состояния. Никаких специальных операций по выделению псевдочистых состояний в отличие от спиновых систем органических молекул, практически не требуется

Какие трудности:

а) прежде всего, это малый уровень сигнала, получаемого при индивидуальном обращении к спину отдельного атома. Измерение, инициализация кубитов при индивидуальном обращении требуют весьма тонких высокочувствительных устройств типа одноэлектронных транзисторов.

б) использование сложной системы электрических затворов для управления состоянием кубитов приводит к возникновению шумов из-за флуктуаций напряжения на затворах.

Модель Ди Винченцо (на гетероструктурах SiGe). В 1999 году Ди Винченцо с соавторами предложил некое продолжение модели Кейна на основе гетероструктур из твёрдых

растворов $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ [5]. В качестве кубитов здесь рассматриваются электронные спины донорных атомов P^{31} вблизи поверхности гетероперехода между двумя слоями с разным содержанием Ge. Использование твердых растворов $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ позволяет изменить эффективную массу электрона так, что эффективный борковский радиус в напряжённом слое $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ становится значительно больше, чем в Si, и отдельные донорные атомы могут располагаться на расстоянии друг от друга на порядок больше, чем в модели Кейна. Следовательно, для формирования таких многокубитовых структур может быть использована современная оптическая литография.

Другим преимуществом такой системы является то, что в зависимости от состава твердого раствора электронный g-фактор меняется от $g(x=1)=1.9995$ до $g(x=0)=1.563$ и поэтому электронный резонанс легко настраивается с помощью задаваемого затвором на эпитаксиальной гетероструктуре электростатического поля, которое смещает максимум распределения электронной плотности на доноре из эпитаксиального слоя с одним значением g в сторону слоя с другим его значением. Индивидуальные электрические заряды на донорах могут детектироваться в этом случае при низких температурах с помощью более простого по сравнению с одноэлектронным транзистором устройства типа обычного МОП-транзистора.

Квантовые компьютеры на электронных спинах имеют преимущество по сравнению с ЯМР-компьютерами: они способны работать при более высоких температурах, порядка температур жидкого гелия.

Роль времени декогерентизации в спиновых системах τ_D играет время поперечной или спин-спиновой релаксации электронных спинов T_2 . Типичное время спин-спиновой релаксации электронных спинов донорных атомов в объемном кремнии составляет сотни микросекунд. Одним из основных механизмов декогерентизации электронных спиновых состояний в слабом магнитном поле может быть взаимодействие электронного спина с ядерными спинами материала матрицы. Еще одним механизмом декогерентизации является

неоднородность внешнего магнитного поля, которая приводит к неточности выполнения квантовых операций.

В предложенной модели существуют следующие проблемы:

а) время спин-спиновой релаксации в *SiGe* не было измерено до сих пор для гетероструктур, предлагаемых в работе. Авторы предполагают, что это время будет достаточным для проведения квантовых вычислений, как в случае с чистым Si,

б) требуется изотопная очистка кремния и германия, поскольку изотопы Si^{29} и Ge^{73} имеют ядерные спины отличные от нуля и взаимодействие с ними приведет к декогерентизации спиновых состояний.

в) для составов твердого раствора, предложенных в работе [5], можно вырастить только очень тонкие напряжённые эпитаксиальные слои без введения в них дислокаций несоответствия [47]. Если точнее, толщина слоев будет составлять всего несколько десятков ангстрем ~ порядка боровского радиуса электрона. Для таких ультратонких слоев имеет смысл говорить о влиянии на величину g-фактора соседнего слоя. Более того, весь эффект построен на перетягивании волновой функции с помощью напряжения, приложенного к затвору, из нижележащего слоя в вышележащий, причем полной ионизации не происходит, электрон остается привязан к донору в нижележащем слое, поэтому величина вкладов от разных слоёв в g-фактор остается открытым вопросом. Следовательно, актуальным является проведение методом электронного парамагнитного резонанса исследований электронов, локализованных на донорах вблизи границы между ультра-тонкими слоями с разным составом *SiGe* твердого раствора.

Близкая по теме работа по исследованию зависимости g-фактора от напряжения на затворе была проведена для двумерного газа в системе GaAs/AlGaAs [48]. Здесь были получены положительные результаты по управлению величиной g-фактора с помощью изменения напряжения на затворе. Существенным отличием этой работы является то, что здесь

исследовались двумерные электроны, а в работе Ди Винченцо рассматриваются электроны локализованные на донорах.

Модели на квантовых точках. На квантовых точках было предложено много моделей реализации квантового компьютера. Первые модели строились на принципе клеточных автоматов с использованием зарядовой или спиновой поляризации. Эти модели можно отнести к прототипам квантовых моделей, поскольку вычисления, проводимые на них, не используют запутанные состояния, необходимые для выполнения двухкубитовых операций. Позднее были предложены модели, использующие зарядовые (орбитальные) состояния в качестве кубитов. Обычно для квантовых вычислений используются два низших энергетических состояния в квантовой точке.

Оценка времени декогерентизации, обусловленного преимущественно взаимодействием двухуровневой системы с акустическими фононами, показывает значительно большее значение по сравнению с временем декогерентизации в трёхмерных структурах, что является проявлением так называемого эффекта "узкого фононного горла" [49] в таких низкоразмерных структурах, какими являются квантовые точки. Хотя в данной работе проблема решалась для зарядовых состояний, результат имеет общий характер и может быть применен и к спиновым состояниям в квантовых точках. Авторы статьи показали возможность эволюции системы кубитов без потери когерентности (*decoherence-free evolution*) в течение времен гораздо больших по сравнению с фемтосекундными временами лазерных импульсов, с помощью которых предполагается управлять состоянием кубитов (роль 0 здесь играет электрон в основном состоянии, роль 1- электрон в возбуждённом).

Для надёжной работы квантового компьютера необходима большая величина отношения $\tau_D/\tau_q \gg 1$, где τ_q^{-1} - тактовая частота компьютера. Время выполнения отдельной логической операции τ_q должно быть достаточно велико для того, чтобы не вызывались переходы в возбужденное орбитальное состояние: $\tau_q \gg h/\Delta E$, т.е. для квантовых точек с размерами в

десятки нанометров τ_q должно быть более десятка пикосекунд. Таким образом, время декогерентизации τ_D в двухуровневой системе должно быть много больше 10^{-11} секунды.

В 1998 году Даниэлем Лоссом и Дэвидом Ди Винченцо была предложена модель квантового компьютера на квантовых точках с дважды вырожденным состоянием электронного спина [10]. Роль кубитов здесь играют спины электронов в квантовых точках. Время декогерентизации для спиновых состояний гораздо больше, чем для зарядовых состояний, причем оно менее чувствительно к флуктуациям электрических полей. Квантовые точки предполагалось создавать путем удержания двумерного электронного газа, образующегося в квантовой яме в плоскости гетероперехода, например в гетероструктуре GaAs/Al_xGa_{1-x}As на ограниченных участках его площади, с помощью электрических затворов, расположенных над гетероструктурой. Чтобы получить кубиты с электронными спинами на такой структуре (один кубит на одну квантовую точку) необходимо точно контролировать число электронов в квантовой точке. Число электронов N в квантовой точке должно быть нечётным числом, сохраняющимся в процессе всех операций, что может быть обеспечено благодаря эффекту кулоновской блокады. В идеальном случае, который соответствует очень малым размерам квантовых точек, $N=1$.

Необходимо отметить, что структуры на основе GaAs/Al_xGa_{1-x}As или других соединений, имеющих кристаллическую решётку без центра инверсии, с точки зрения требования по длительности времени декогерентизации проигрывают структурам на кремниевой основе. Время спиновой релаксации в них порядка времени релаксации импульса электрона, что составляет наносекунды и на несколько порядков меньше, чем в кремнии.

На начальном этапе практически все публикации по квантовым точкам были посвящены таким системам, в которых точки создаются с помощью электрических затворов из двумерного газа, например системе на основе гетероструктуры GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Флуктуации напряжения на затворах неизбежно приводят к декогерентизации в таких системах.

С этой точки зрения хороши квантовые точки, созданные на основе эффекта самоорганизации при гетероэпитаксии материалов с различной постоянной решетки, то есть без использования затворов. Но для них существует проблема управления и измерения состояния отдельного кубита. Хорошие перспективы в данном направлении открывают работы Шкляева и др. [50] по контролируемому зарождению трехмерных островков Ge при гетероэпитаксии Ge/Si(111). В предложенном подходе выращивался плоский напряжённый слой Ge, нестабильный по отношению к формированию 3D островков. Затем фокусированным электронным пучком создавались места преимущественного зарождения трёхмерных островков. При дальнейшем отжиге структуры островки зарождаются именно в местах воздействия электронным пучком, таким образом можно задавать конкретное местоположение островков (квантовых точек) и период их расположения.

На роль «кубитов» в квантовых точках могут претендовать электронные или дырочные состояния отдельно, либо экситонные состояния. В объёмном кристалле время спиновой релаксации дырок очень мало и по порядку сравнимо со временем релаксации импульса, поскольку спин-орбитальное взаимодействие в валентной зоне велико и приводит к жесткой связи между угловым моментом и импульсом дырки. Квантование приводит к эффективному выделению (отщеплению) тяжёлой дырки из вырожденного состояния в центре зоны Бриллюэна, и, как правило, уровни квантования в основном (на ~80%) принадлежат состоянию тяжёлой дырки [51]. Такое же явление (снятие вырождения в валентной зоне) наблюдается в объёмных кристаллах при приложении одноосного сжатия. Этот эффект приводит в объёмных кристаллах к увеличению времени спиновой релаксации дырок, что подтверждается в работе [52]. Поэтому можно ожидать, что в квантовых точках, благодаря своеобразному снятию вырождения, время спиновой релаксации возрастет. Присутствие деформаций внутри квантовой точки приводит к дополнительному сдвигу энергетических уровней и увеличению расщепления между зонами тяжёлой и лёгкой дырок, что также может привести к увеличению времени релаксации дырок. На сегодня существуют

экспериментальные работы по измерению времени спиновой релаксации дырок только в двумерных системах [53] или в составе экситонов в квантовых точках [54], и, как правило, эти работы связаны с оптическими измерениями. Исследование спиновой релаксации является актуальной задачей не только для дырочных состояний, но и для электронов, хотя в последнем случае эффекты понижения размерности должны привести к гораздо более длительным временам спиновой релаксации.

1.3. Исследование спиновой релаксации в полупроводниковых наноструктурах

Большое количество работ по исследованию спиновой релаксации связано с применением импульсных оптических методик, в частности так называемой *pump-probe* спектроскопии (метод возбуждения-зондирования). Как правило, здесь используется явление оптической ориентации спинов при поглощении циркулярно-поляризованного света [55]. Несмотря на то, что возможность оптической ориентации свободных электронов впервые была продемонстрирована на кремнии [56] данная методика применяется в основном для оптически активных материалов. Для двумерных структур данный метод был применен для исследования спиновой релаксации, как электронов, так и дырок [53].

Для исследования времени спиновой релаксации в квантовых точках наряду с импульсными оптическими методами используют метод, основанный на эффекте Ханле [57]. В экспериментах по степени циркулярной поляризации фотолюминесценции судят о времени релаксации компоненты электронного спина вдоль некоторого выделенного направления. Например, если спины электронов первоначально ориентированы вдоль направления X , то поперечное магнитное поле B направленное вдоль Z вызовет прецессию спинов с ларморовской частотой $\Omega = 2\pi\mu_B gB/h$. Среднее значение спина как функции

магнитного поля в этом случае даётся кривой Ханле: $S_z(B) = \frac{S_z(0)}{1 + (\Omega T_s)^2}$, $S_z(0) = \frac{S_0}{1 + \tau/\tau_s}$.

Полуширина данной кривой определяется эффективным временем жизни спина

$1/T_s = 1/\tau + 1/\tau_s$, где τ - время жизни электрона, τ_s – время спиновой релаксации. Таким образом, зная g-фактор, можно измерить время спиновой релаксации носителей, что и было сделано для квантовых точек InAs в гетеросистеме InAs/GaAs [57].

В работе [58] был предложен способ измерения времени спиновой декогерентизации в квантовой точке на основе эффекта спин-зависимого туннелирования. Рассматривается квантовая точка, связанная с контактами туннельно прозрачными барьерами в режиме кулоновской блокады (см. рис.1.3.1). Если в квантовой точке изначально находится электрон со спином вверх, то туннелирование запрещено законом сохранения энергии при $E_s > \mu_1 > E_s - \Delta_z > \mu_2$, где E_s - энергия синглетного состояния, Δ_z - энергия зеемановского расщепления в квантовой точке, μ_1, μ_2 – хим. потенциалы в контактах. Если зеемановское расщепление носителей в контакте не равно зеемановскому расщеплению в квантовой точке, то приложением СВЧ излучения $h\nu = \Delta_z$ можно индуцировать туннельный ток через квантовую точку. Спин носителя в квантовой точке переворачивается, он переходит на верхний зеемановский уровень, освобождая для туннелирования нижний зеемановский уровень. В спектре туннельного тока появляется пик, ширина которого определяется временем спиновой декогерентизации T_2 . По положению пика (значению магнитного поля) можно определить g-фактор носителя в квантовой точке.

Добавив к такой квантовой точке еще одну, можно использовать двойную квантовую точку как спиновый фильтр, а в случае со спин-поляризованными контактами как устройство определения спиновой поляризации носителей в контакте. Для одного направления спина туннелирование через квантовую точку будет разрешено, а для другого запрещено.

В отличие от дырок для электронов в низкоразмерных системах существует гораздо больше экспериментальных работ по измерению времен спиновой релаксации, и кроме оптических методов, здесь используется наиболее прямой способ измерения – метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

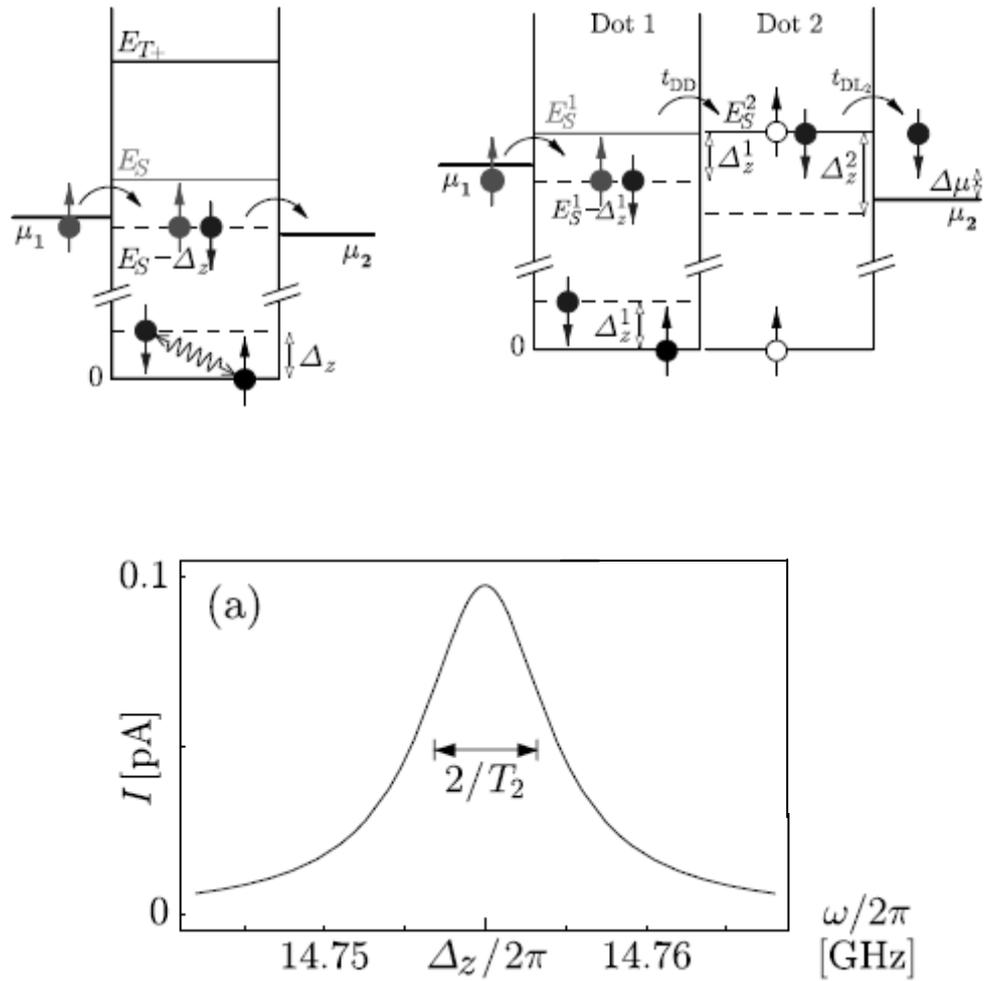


Рис. 1.3.1. Схематическое изображение квантовой точки, связанной с контактами туннельно прозрачными барьерами. Если в квантовой точке изначально находится электрон со спином вверх, то туннелирование запрещено законом сохранения энергии при $E_s > \mu_1 > E_s - \Delta_z > \mu_2$, где E_s - энергия синглетного состояния, Δ_z - энергия зеемановского расщепления в квантовой точке, μ_1, μ_2 - хим. потенциалы в контактах. Перевернув спин электрона в квантовой точке с помощью СВЧ излучения $h\nu = \Delta_z$, можно индуцировать туннельный ток через квантовую точку.

Данный метод напрямую может дать сведения не только о g -факторе и времени спиновой релаксации, но и позволяет сделать выводы о величине и виде спин-орбитального взаимодействия. По отклонению g -фактора от величины g -фактора свободного электрона можно судить о величине спин-орбитального взаимодействия в структуре. А время спиновой релаксации и его зависимость от параметров и свойств объекта может дать информацию о взаимодействиях, влияющих на спиновую ориентацию.

В работе [59] методом ЭПР для двумерных электронов экспериментально доказано существование поля Бычкова – Рашбы [27] в $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ структуре с модуляцией легирования верхнего SiGe слоя.. Авторы обнаружили анизотропию времени дефазировки T_2 и g -фактора двумерных электронов проводимости в асимметричной $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ квантовой яме. Авторы объясняют наблюдаемую анизотропию в соответствии с существованием спин-орбитального взаимодействия Бычкова – Рашбы $\hat{H} = \alpha(\hat{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{e}_z$, которое эквивалентно взаимодействию спина электрона с эффективным магнитным полем, лежащим в плоскости двумерного слоя. Существование такого эффективного поля связано с отсутствием в системе зеркальной симметрии относительно плоскости двумерного электронного газа. Эта асимметрия вызвана введением легирующего слоя сурьмы только с одной стороны квантовой ямы. Электрическое поле, создаваемое ионами сурьмы, в системе отсчета движущегося электрона, переходит в эффективное магнитное поле, лежащее в плоскости двумерного газа. Было обнаружено, что параметр взаимодействия Бычкова–Рашбы $\alpha = 0,55 \times 10^{-12}$ эВ см, на три порядка меньше, чем в структурах с квантовыми ямами, созданных на основе A_3B_5 полупроводников. Это согласуется с тем, что в Si спин – орбитальное взаимодействие много меньше, чем в полупроводниках типа A_3B_5 . Анизотропия g -фактора увеличивается с увеличением концентрации носителей. Для концентрации $n_s \sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$ анизотропия не наблюдается, а при увеличении концентрации до $7 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ анизотропия достигает максимального значения $\Delta g = g_{\square} - g_{\perp} \approx 8 \cdot 10^{-4}$. Это объясняется тем,

что для свободных электронов квазиимпульс k_F зависит от концентрации как $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$, а величина поля Бычкова-Рашбы определяется как $H_{BR} = \alpha \cdot k_F$. После экстраполяции для низкой плотности носителей было получено значение g – фактора для двумерных электронов в Si, $g=2.00073 \pm 0.00010$. В магнитном поле перпендикулярном плоскости структуры наблюдается наиболее узкая и интенсивная линия с шириной $\Delta H = 3.4 \cdot 10^{-2}$ Гс. В магнитном поле, направленном вдоль плоскости структуры линия уширяется, и ширина достигает $\Delta H = 50 \cdot 10^{-2}$ Гс. Экспериментальные данные позволили оценить величину поля Бычкова – Рашбы в исследуемых структурах в пределах 10-20 Гс. Экстремально узкие линии (длительное время дефазировки) позволяют сделать вывод о том, что электроны, локализованные в Si квантовых ямах в гетероструктурах SiGe/Si/SiGe, являются перспективными для использования в спинтронике.

Работа [59] является продолжением исследований двумерного электронного газа проведенных методом электрически-детектируемого ЭПР в 1998 году Граэффом и соавторами [60]. Они также обнаружили анизотропию g -фактора (рис. 1.3.2), однако объяснили её расщеплением дна зоны проводимости за счёт одноосной деформации, существующей в Si канале из-за разницы постоянных решёток Si и $Si_{(1-x)}Ge_x$. Дно зоны проводимости в Si образовано шестью Δ -долинами. За счёт одноосных деформаций две Δ -долины, расположенные вдоль направления [001], опускаются, остальные четыре Δ -долины поднимаются вверх. Электроны заполнены только две нижние Δ -долины, и угловая зависимость g -фактора описывается той же угловой зависимостью, что и g -фактор электронов в одной из этих долин (эллипсоидов вращения с главной осью, направленной вдоль [001]): $g(\theta) = \sqrt{g_{\parallel}^2 \cos^2(\theta) + g_{\perp}^2 \cdot \sin^2(\theta)}$, где θ - угол между направлением магнитного поля и направлением [001]. Однако эта модель не объясняет возрастание анизотропии g -фактора с увеличением концентрации носителей заряда в Si канале, тем более, что для

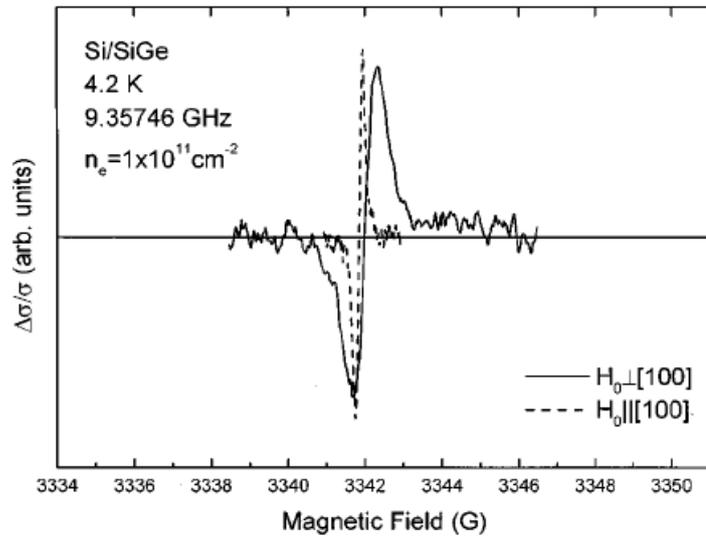
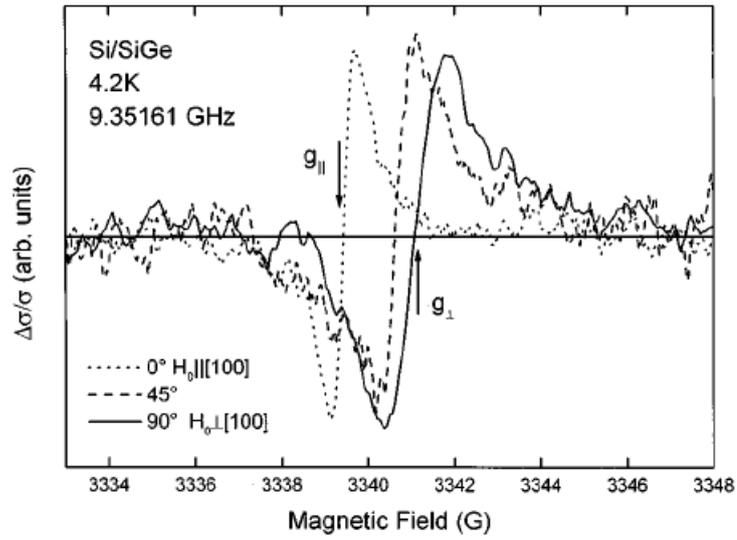


Рис. 1.3.2. Анизотропия сигнала электрически детектируемого ЭПР для электронов в двумерном Si канале в структуре $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ (данные работы [60]). На верхней панели угловая зависимость сигнала для концентрации $n_s \sim 7 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, на нижней панели – для концентрации $n_s \sim 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

концентрации $n_s \sim 10^{11} \text{см}^{-2}$ анизотропия вообще не наблюдается. Таким образом, более правильная модель, объясняющая анизотропию g-фактора, была выдвинута в более поздней работе [59].

Определение основного механизма декогерентизации спинов электронов является актуальной задачей при разработке структур для квантовых вычислений. В работе [61] авторы с помощью методики спинового эха для свободных двумерных электронов в структурах типа $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ определили истинные времена спиновой релаксации и выявили основную причину декогерентизации спинов носителей заряда. Было получено, что время спиновой когерентности (T_2) составляет около 3 мкс, а время продольной релаксации T_1 (время установления равновесной заселенности уровней) около 2 мкс. Декогерентизацию спина авторы объясняют в терминах эффективного магнитного поля Бычкова-Рашбы, лежащего в плоскости двумерного газа и меняющего свое направление в плоскости при каждом акте рассеяния квазиимпульса электрона. Данное объяснение основано на наблюдаемой в эксперименте большой анизотропии T_2 и того факта, что $T_2 > T_1$ при приложении внешнего магнитного поля в направлении перпендикулярном к двумерному слою электронов. Случайное изменение эффективного магнитного поля, лежащего в плоскости роста структуры, приводит к изменению направления прецессии спина и потере спиновой когерентности. Для увеличения времени спиновой когерентности авторы предлагают локализовать электроны на квантовых точках, чтобы исключить механизм декогерентизации, связанный с движением электрона. Проведенный в данной работе эксперимент с использованием методики спинового эха эквивалентен однокубитовым операциям на ансамбле двумерных электронов. Так же как и в предыдущей работе, авторы оценили величину поля Бычкова-Рашбы в Si/SiGe структуре в диапазоне 10-20 Гс.

В работе [62] были представлены результаты исследований методом ЭПР электронов, локализованных в регулярном массиве Ge/Si квантовых точек, выращенных на специально подготовленных Si подложках [63]. Поверхностный рельеф подложки представлял собой

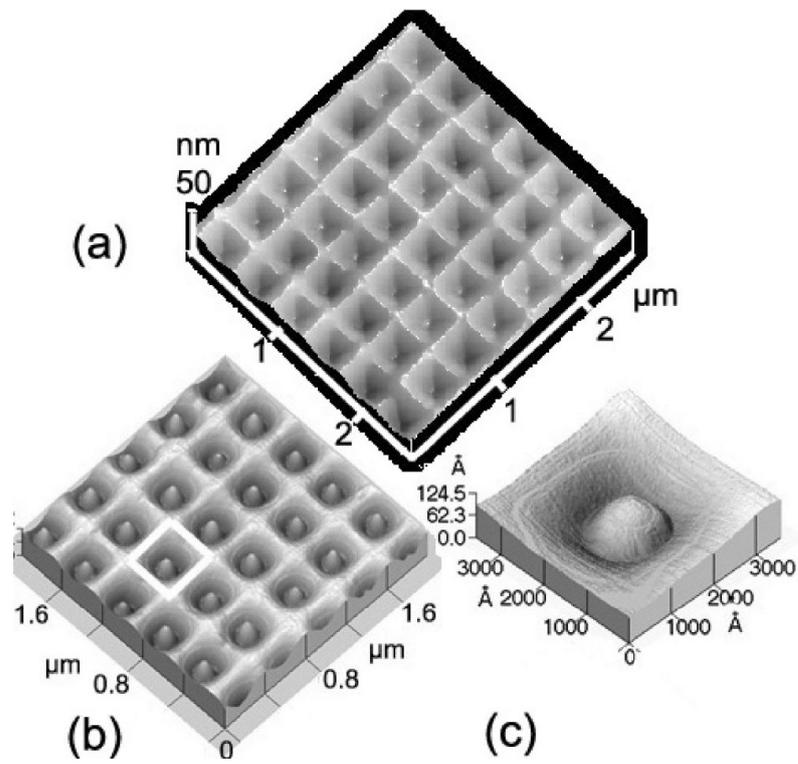


Рис. 1.3.3. Трёхмерные изображения специально-подготовленных Si(100) подложек, полученные методом атомно-силовой микроскопии, до осаждения (a) и после осаждения Ge (b). Трёхмерный островок, зародившийся в центре пирамидальной ямки (c) [63].

упорядоченную систему ямок пирамидальной формы расположенных точно в узлах двумерной решётки, причём период решётки, размеры и глубину ямок можно было контролируемо изменять. Условия роста подбирались таким образом, чтобы зарождение и последующий рост трёхмерных островков Ge происходил строго в центре пирамидальных ямок (рис. 1.3.3). Тем самым обеспечивалась очень высокая степень упорядоченности островков по положению и размеру. Дисперсия островков по размеру в таких структурах не превышала 4%. Авторами работы были так же проведены ЭПР-исследования обычных, полученных в результате самоорганизации, Ge/Si квантовых точек. В этом случае островки были не упорядочены по положению, а дисперсия по размерам составляла около 10%. ЭПР наблюдался в условиях облучения образца светом с энергией фотонов меньше ширины запрещенной зоны E_g . В этом случае генерация электрон-дырочных пар должна происходить в квантовых точках. Электроны должны локализоваться в Si, окружающем Ge квантовые точки, где за счёт деформационных полей создается потенциальные ямы для электронов. В обоих случаях наблюдалась ЭПР линия с g-фактором, близким к g-фактору электронов проводимости в Si, с изотропной угловой зависимостью. Времена спиновой релаксации оказались близки к временам, наблюдаемым в двумерной SiGe структуре [59], но линия ЭПР имела неоднородное уширение. Наблюдаемый сигнал хорошо соотносился с числом квантовых точек в образце так же, как и с числом электрон-дырочных пар, произведённых облучением светом. Наблюдаемое время релаксации спина составило порядка микросекунды, что значительно меньше ожидаемого времени для электрона, локализованного в Si, и более характерно для двумерных электронов. Авторы отмечают, что по причине больших размеров КТ (~100 нм) квантование в плоскости x_y может быть недостаточным. Необходимо проведение дополнительных экспериментов в системе с более эффективной локализацией электронов.

Таким образом, существующие на сегодня исследования показывают, что понижение размерности объекта должно приводить к увеличению времени спиновой релаксации при

условии высокой симметрии квантовой структуры. Отсутствие симметрии может привести к появлению дополнительных механизмов потери спиновой ориентации. Для получения длительных времен спиновой релаксации необходима эффективная локализация электрона во всех трёх направлениях. С этой точки зрения особенно перспективными являются Ge/Si квантовые точки, поскольку локализация электрона в данной системе происходит в Si, где из-за малости спин-орбитального взаимодействия могут быть достигнуты наиболее длительные времена спиновой релаксации [2-4]. Исследование спиновых свойств носителей заряда, локализованных в Ge/Si квантовых точках, является актуальной задачей, как с фундаментальной точки зрения (получение новых знаний о строении и свойствах материи), так и с точки зрения практического применения (создание приборов, использующих спиновую степень свободы.)

ГЛАВА 2. G-ФАКТОР ДЫРОК В Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

2.1. Описание объекта исследования и постановка задачи

Квантовые точки Ge/Si формируются в процессе гетероэпитаксии Ge на подложке Si, когда в определенных условиях происходит переход от двумерно-слоевого механизма роста Ge пленки к трёхмерному росту. Согласно данным, полученным с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) характерные размеры островков составляют 10-20 нм, высота 1-2 нм (рис.2.1.1 (а)), таким образом, поведение носителей заряда в этих островках определяется квантово-размерными эффектами [64]. Существующий разрыв энергетических зон и деформационные эффекты приводят к формированию потенциальной ямы в Ge лишь для дырок. В то же время Ge островок является потенциальным барьером для электронов в зоне проводимости, и поэтому удержание электронов внутри Ge островка невозможно. Тем не менее, возможен захват электронов вблизи островка, в окружающей его области кремниевой матрицы. Две причины обеспечивают возможность захвата электронов: во-первых, неоднородное поле упругой деформации, создающее потенциальную яму для электронов вблизи границы раздела Ge/Si, и, во-вторых, кулоновское притяжение электронов к дыркам, захваченным квантовой точкой. Энергия связи электронов, локализованных вблизи заряженной Ge квантовой точки, составляет десятки мэВ [7] и сильно зависит от зарядового состояния квантовой точки, — так, при добавлении дырок в островок энергия связи электрона увеличивается в несколько раз. В случае пустой (незаряженной) Ge квантовой точки энергия связи электронов составляет около 7-10 мэВ [7].

Наиболее точно особенности структуры, характерную форму и размеры квантовых точек Ge в Si отражает геометрическая модель, приведенная на рис. 2.1.1 (б). Согласно этой модели квантовые точки имеют форму квадратной пирамиды с основанием (001) и боковыми гранями {105} и располагаются поверх тонкой сплошной плёнки Ge толщиной 5 монослоёв (≈ 0.7 нм). Отношение высоты островка к длине стороны основания равно 1:10.

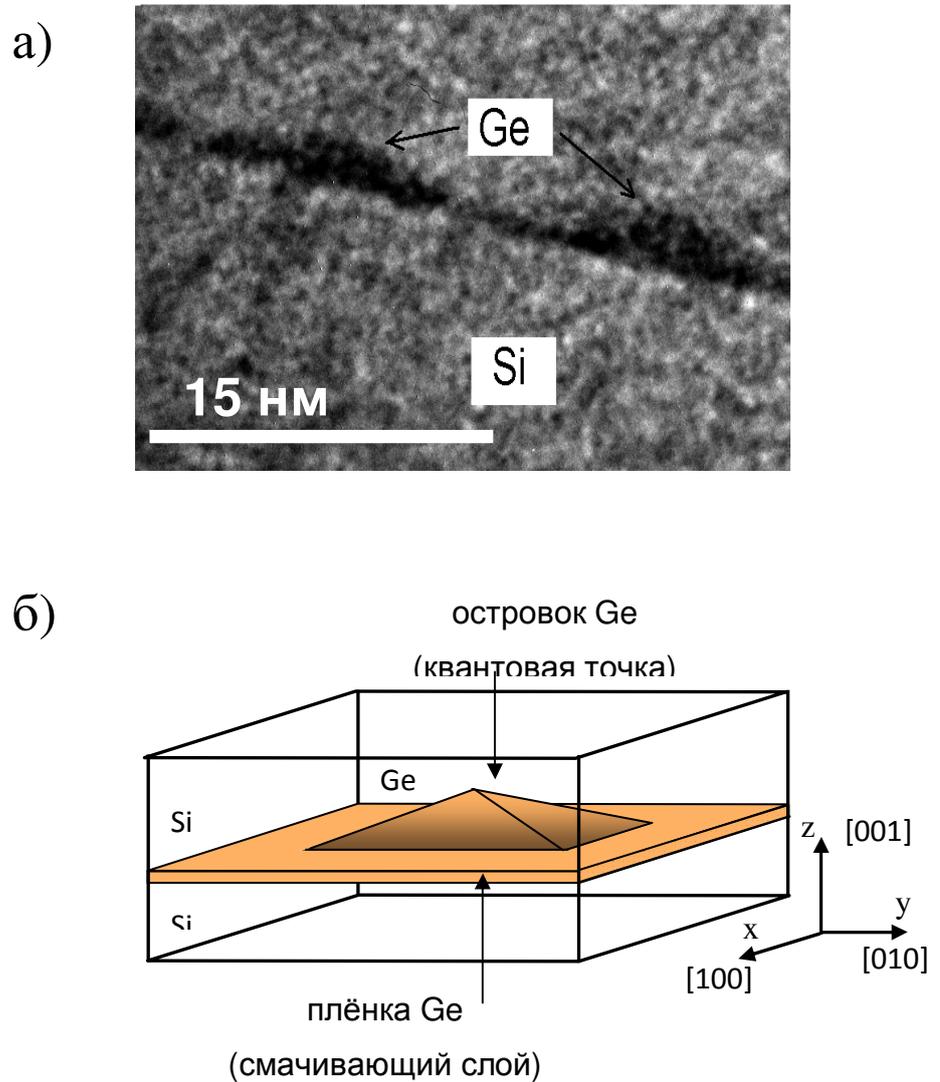


Рис. 2.1.1. (а) изображение Ge квантовых точек, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии; (б) геометрическая модель квантовой точки Ge, представляющая собой квадратную пирамиду. Размер основания пирамиды 15 нм, высота 1.5 нм, толщина смачивающего слоя 0.7 нм

Состояния в квантовой точке в основном формируются из состояний Γ -максимума валентной зоны, то есть представляют собой суперпозицию состояний $|3/2, \pm 3/2\rangle$ и $|3/2, \pm 1/2\rangle$ (состояние характеризуется проекцией момента на ось Z , главную ось квантования – см. рис.2.1.1). Геометрия островка (высота пирамиды h много меньше размера основания l , $h/l \sim 0.1$) приводит к тому, что энергетический спектр в основном определяется размерным квантованием в направлении роста. По простейшим оценкам, пользуясь соотношением неопределенности и рассмотрев островок как потенциальный ящик [32], можно заключить, что подавляющий вклад в основное состояние вносит подзона тяжёлых дырок. Этот эффект усиливается и существующим распределением деформаций в квантовой точке [65], приводящим к расщеплению подзон лёгких и тяжёлых дырок. Поскольку островок растянут вдоль оси Z , то на дне валентной зоны оказываются состояния тяжёлых дырок [66]. Характер волновых функций будет близок к состоянию $|3/2, \pm 3/2\rangle$, поэтому можно ожидать, что в магнитном поле дырка, локализованная в Ge квантовой точке, будет вести себя как тяжёлая.

Для типичной Ge квантовой точки с высотой $h=1.5$ нм и размером основания $l=15$ нм (см. рис.2.1.1) энергию размерного квантования можно оценить как $E = \pi^2 \hbar^2 / 2m^* a^2$, где m^* — эффективная масса дырки, a — толщина Ge слоя, включающего в себя высоту пирамиды и толщину смачивающего слоя. Принимая $m^* = 0.2m_0 \approx 0.2 \cdot 10^{-30}$ кг, $a = 2.1$ нм (толщина смачивающего слоя 0.7 нм), получим $E \approx 0.4$ эВ. Для того чтобы магнитное поле существенно влияло на энергетический спектр внутри квантовой точки, надо чтобы $\hbar\omega_c \geq E$. Это условие выполняется для магнитных полей $B \geq B_c$, где $B_c \sim 100$ Тл. Поэтому даже для полей порядка ~ 10 Тл взаимодействие с магнитным полем можно рассматривать по теории возмущения.

Зеемановское взаимодействие с магнитным полем \mathbf{H} для частицы с эффективным магнитным моментом \mathbf{M} записывается в следующей форме: $\mathbf{M} \cdot \mathbf{H}$.

В квантовых точках, выращенных на основе кубических полупроводников, даже вдоль наиболее симметричного направления [001], направления [110] и $[1\bar{1}0]$ не эквивалентны, поэтому симметрия в реальных квантовых точках не выше C_{2v} . Следовательно, энергетические уровни в отсутствие магнитного поля двукратно вырождены.

Для состояний крамерсовского дублета зеемановское взаимодействие равно $\frac{1}{2}\mu_B\sigma_\alpha g_{\alpha\beta}H_\beta$, где σ_α ($\alpha=x,y,z$)- матрицы Паули, \mathbf{H} -магнитное поле, μ_B -магнетон Бора, $g_{\alpha\beta}$ – тензор, имеющий в общем случае девять независимых компонент [67]. В большинстве случаев (за исключением структур с довольно низкой симметрией) величины $g_{xy}=g_{yx}$ и т. д., и перекрёстные члены могут быть исключены подходящим выбором осей X,Y,Z (известных как главные оси). В этих осях g -тензор характеризуется тремя главными значениями g_{xx}, g_{yy}, g_{zz} .

Введем \mathbf{M}_{QD} – полный угловой момент дырки в квантовой точке и запишем гамильтониан взаимодействия с магнитным полем в следующей форме:

$$\hat{H}_{QD}(\mathbf{H}) = \mu_B(\mathbf{H}\hat{\mathbf{M}}_{QD}). \quad (2.1.1)$$

В 1-м порядке теории возмущений g -фактор можно определить из решения секулярного уравнения, которое даёт:

$$|g| = 2\sqrt{\langle\psi|\mathbf{n}\hat{\mathbf{M}}_{QD}|\psi\rangle^2 + \left|\langle\psi|\mathbf{n}\hat{\mathbf{M}}_{QD}|\psi^*\rangle\right|^2}, \quad (2.2.2)$$

где ψ^*, ψ - волновые функции, составляющие крамерсовский дублет для данного уровня, \mathbf{n} - единичный вектор в направлении магнитного поля.

Следовательно, для определения g -фактора необходимо найти матричные элементы оператора $\hat{\mathbf{M}}_{QD}$. Для определения матричных элементов необходимо решить задачу нахождения собственных волновых функций ψ^*, ψ для состояний дырки в квантовой точке.

В работе [68] эта задача была решена при расчете энергетического спектра дырок в квантовых точках. Для этого использована модель сильной связи с базисом sp^3 . При

сопоставлении полученных результатов с экспериментальными данными получено убедительное доказательство того, что данный метод является адекватным для решения поставленной задачи.

Поэтому в дальнейшем наши расчёты будут основаны на методе сильной связи.

Необходимо решить следующие задачи. Получить выражение для оператора магнитного момента дырки (электрона) в представлении, базисом которого является набор атомных орбиталей. Используя это выражение, вычислить значение g -фактора в приближении сильной связи.

2.2. Метод сильной связи

Суть метода сильной связи состоит в том, что волновая функция ищется в виде суперпозиции некоторого фиксированного набора исходных функций — атомных орбиталей. Обычно в задачах физики твёрдого тела предполагается, что все атомные орбитали взаимно ортогональны, — в этом случае набор орбиталей можно рассматривать как полный набор базисных состояний. В представлении, соответствующем этому набору базисных состояний (или в «представлении атомных орбиталей») гамильтониан имеет вид матрицы $a \cdot N \times a \cdot N$, где N — число атомов в рассматриваемой структуре, a — число орбиталей, приходящихся на один атом. Каждая строка и столбец матрицы гамильтониана соответствует некоторой орбитали. Метод сильной связи требует порядка 10 переменных на каждый атом. Метод сильной связи корректно учитывает основные особенности задачи — удержание дырок в потенциальной яме, созданной гетеробарьером, неоднородное распределение деформации, атомную структуру вещества, — и таким образом даёт физически разумные результаты. Метод сильной связи автоматически обеспечивает приемлемые граничные условия на границе раздела двух сред и правильную симметрию волновых функций.

Параметры метода сильной связи — энергии орбиталей и энергетические интегралы перекрытия между орбиталями — определяются путём подгонки зонной структуры вещества. В рамках метода сильной связи гамильтониан электронной системы можно записать следующим образом:

$$\hat{H}_e = \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\alpha} + \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} I_{i\alpha,j\beta} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{j\beta}, \quad (2.2.1)$$

где индексы i, j пробегает по всем атомам, α, β — по всем типам орбиталей; $\hat{a}_{i\alpha}^+, \hat{a}_{i\alpha}$ — операторы рождения и уничтожения электрона на α -й орбитали i -го атома; $\epsilon_{i\alpha}$ — энергия этой орбитали; $I_{i\alpha,j\beta}$ — энергетический интеграл перекрытия между α -й орбиталью i -го атома и β -й орбиталью j -го атома (если $i=j$ и $\alpha=\beta$, то $I_{i\alpha,j\beta} = 0$). Для простоты мы опустили здесь слагаемые, ответственные за электрон-электронное взаимодействие. Из

эрмитовости гамильтониана следует, что $I_{i\alpha, j\beta} = I_{j\beta, i\alpha}^*$. Операторы рождения и уничтожения удовлетворяют соотношениям $\hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{j\beta} + \hat{a}_{j\beta} \hat{a}_{i\alpha}^+ = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$, где δ — символ Кронеккера. Число электронов N_e определяется оператором $\hat{N}_e = \sum_{i,\alpha} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\alpha}$.

В одноэлектронном случае ($N_e = 1$) гамильтониан (2.2.1) сводится к матрице $aN \times aN$, где a — число разных типов орбиталей, N — число атомов. Коэффициенты этой одноэлектронной матрицы связаны с коэффициентами выражения (2.2.1) следующим образом: матричный элемент, находящийся на пересечении строки $i\alpha$ и столбца $j\beta$ в одноэлектронном гамильтониане, равен коэффициенту при члене $\hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{j\beta}$ в формуле (2.2.1). Собственные значения одноэлектронного гамильтониана дают значения энергии электрона, а собственные векторы представляют собой наборы коэффициентов разложения волновых функций по атомным орбиталям (иначе говоря, наборы амплитуд вероятностей нахождения электрона на различных орбиталях).

В дальнейшем мы будем использовать только одноэлектронный гамильтониан¹. Рассмотрим переход от электронного к дырочному представлению. Чтобы перейти от электронного представления к дырочному, нужно каждый из операторов рождения электрона $\hat{a}_{i\alpha}^+$ заменить на оператор уничтожения дырки $\hat{b}_{i\alpha}$, и наоборот, оператор уничтожения электрона $\hat{a}_{i\alpha}$ — на оператор рождения дырки $\hat{b}_{i\alpha}^+$. Тогда гамильтониан (2.2.1) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H}_e &= \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha}^+ + \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} I_{i\alpha, j\beta} \hat{b}_{i\alpha} \hat{b}_{j\beta}^+ = \\ &= \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha} (1 - \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha}) - \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} I_{i\alpha, j\beta} \hat{b}_{j\beta}^+ \hat{b}_{i\alpha} = \\ &= \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha} - \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha} \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} - \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} I_{i\alpha, j\beta}^* \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{j\beta} = E_{\max} + \hat{H}_h, \end{aligned}$$

¹ Представление гамильтониана в виде (2.2.1) введено здесь, во-первых, для более компактной записи и, во-вторых, для рассмотрения перехода от электронного к дырочному представлению.

где

$$E_{\max} = \sum_{i,\alpha} \epsilon_{i\alpha},$$

$$\hat{H}_h = \sum_{i,\alpha} (-\epsilon_{i\alpha}) \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{i\alpha} + \sum_{i,\alpha} \sum_{j,\beta} (-I_{i\alpha,j\beta}^*) \hat{b}_{i\alpha}^+ \hat{b}_{j\beta}.$$

Таким образом, «дырочный» гамильтониан \hat{H}_h отличается от «электронного» \hat{H}_e только противоположным знаком и комплексным сопряжением всех коэффициентов. Такова же связь между одночастичными гамильтонианами в электронном (\hat{H}_{1e}) и дырочном (\hat{H}_{1h}) представлениях: $\hat{H}_{1h} = -(\hat{H}_{1e})^*$. Следовательно, уровни энергии в дырочном представлении отличаются от соответствующих уровней в электронном представлении только знаком, а волновые функции дырочного представления получаются из соответствующих волновых функций электронного представления комплексным сопряжением. Различие в знаке энергии между электронным и дырочным представлениями обычно компенсируют тем, что отсчитывают энергию дырок в обратном направлении на энергетической шкале. Различие между волновыми функциями электронного и дырочного представления также становится несущественным, если интересоваться только вероятностями заполнения орбиталей, а не амплитудами вероятностей. Таким образом, с точки зрения задачи нахождения энергетического спектра и волновых функций, нет никакой разницы — использовать ли электронное или дырочное представление. Из соображений удобства мы будем пользоваться электронным «языком» при рассмотрении модели и алгоритма решения задачи (так как модель содержит состояния, относящиеся как к валентной зоне, так и к зоне проводимости, и поэтому целесообразно рассматривать зону проводимости и валентную зону в рамках одного и того же представления). Однако при обсуждении результатов расчёта будем говорить о состояниях в валентной зоне как о состояниях дырок.

Теперь кратко рассмотрим особенности модели сильной связи для исследуемой

гетеросистемы Ge/Si. Атом кремния имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$,

атом германия — $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$. При объединении атомов в кристалл внутренние заполненные оболочки практически не изменяются; они вместе с ядром образуют атомный остов. Электроны внешних оболочек ($3s$ и $3p$ в Si, $4s$ и $4p$ в Ge) претерпевают sp^3 -гибридизацию. Из этих гибридизованных электронных состояний формируются верхние ветви валентной зоны и нижние ветви зоны проводимости [69], т. е. все те состояния, из которых образованы состояния дискретного спектра в квантовых точках. Поэтому естественным набором орбиталей для моделирования состояний в квантовых точках будет sp^3 , т. е. одна s -орбиталь и три взаимно ортогональные p -орбитали. Таким образом, будет использована модель сильной связи с базисом sp^3 , развитая в работе [70].

Для учёта взаимодействия между ближайшими соседями удобным является двухцентровое приближение [69], так как оно даёт возможность естественного введения деформационных эффектов. В атомистической модели деформация кристалла означает изменение длин межатомных связей, изменение направлений связей и изменение симметрии кристаллического поля, окружающего атомы. Изменение длин связей приводит к изменению значений интегралов перекрытия по отношению к их значениям в недеформированном кристалле. Наиболее общепринятым законом зависимости интегралов перекрытия от длины связи является обратная квадратичная зависимость, предложенная У. Харрисоном [69]: $I \sim d^{-2}$, где I — интеграл перекрытия, d — длина связи. Однако в ряде случаев оказывается необходимым принять эту зависимость в обобщённом виде: $I \sim d^{-n}$, где n — коэффициент, зависящий от типа интеграла перекрытия. Так как отклонения длины связи d от её равновесного значения d_0 малы, то зависимость $I \sim d^{-n}$ можно представить в линеаризованном виде: $I \sim (1 - n(d - d_0)/d_0)$. Мы будем использовать такую линеаризованную зависимость. Для учёта изменения направлений связей введена

зависимость межатомных матричных элементов гамильтониана от ориентации соответствующих связей [71].

Искажение кристаллического поля вследствие деформации можно рассматривать как возмущение, которое при малых деформациях должно быть пропорционально тензору деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}$. Возмущение такого рода рассматривалось, например, в работе [72] для d -орбиталей. Вид возмущающего гамильтониана легко определить из требования его инвариантности по отношению к преобразованиям, совмещающим решётку саму с собой и оставляющим на месте рассматриваемый атом (эти преобразования составляют группу T_d).

В представлении, определяемом базисными векторами $|p_x^{(i)}\rangle$, $|p_y^{(i)}\rangle$, $|p_z^{(i)}\rangle$ для некоторого атома i , возмущающий гамильтониан выглядит следующим образом:

$$\hat{H}_\varepsilon^{(i)} = \alpha \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} + \beta \cdot \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & 0 & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & 0 \end{pmatrix} + \gamma \cdot \begin{pmatrix} v_x & 0 & 0 \\ 0 & v_y & 0 \\ 0 & 0 & v_z \end{pmatrix}, \quad (2.2.2)$$

где α , β , γ — некоторые (произвольные) константы; $\varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$; $v_x = 2\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz}$ и аналогично для v_y , v_z . Таким образом, влияние деформационного искажения кристаллического поля в нашей модели учитывается тем, что к энергии каждой p -орбитали добавляется слагаемое, пропорциональное значению тензора деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}$ в окружении атома, которому принадлежит орбиталь.

И последнее, что закладывается в рассматриваемую модель сильной связи, — это *спин-орбитальное взаимодействие*. Это взаимодействие приводит к расщеплению шестикратно вырожденной в точке Γ валентной зоны на четырёхкратно вырожденную (зону лёгких и тяжёлых дырок) и двукратно вырожденную (спин-отщеплённую зону). Величина расщепления составляет ~ 0.3 эВ в германии, — эта величина сопоставима с энергией размерного квантования дырок в Ge/Si квантовых точках, а следовательно, учёт

спин-орбитального взаимодействия необходим при вычислении дырочного спектра квантовых точек.

Спин-орбитальное взаимодействие появляется в уравнении Шрёдингера-Паули ([31], § 33) в виде добавки к гамильтониану, имеющей следующий вид:

$$\hat{H}_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \hat{\mathbf{g}} [\nabla U \times \hat{\mathbf{p}}], \quad (2.2.3)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса, U — потенциальная энергия электрона, $\hat{\mathbf{g}}$ — вектор, составленный из матриц Паули

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

которые действуют на спиновую переменную. В атоме (в условиях применимости рассельсаундеровского приближения — см. [32], § 72) выражение (2.5) переходит в

$$A \hat{S} \hat{L}, \quad (2.2.4)$$

где величина A зависит от атомного терма, \hat{S} и \hat{L} — операторы полного спина и полного орбитального момента. Из (2.2.3), (2.2.4) видно, что спин-орбитальное взаимодействие перемешивает координатные и спиновую переменные. Поэтому для включения спин-орбитального взаимодействия в нашу модель необходимо, во-первых, ввести спиновую переменную и, во-вторых, добавить к гамильтониану сильной связи (2.2.1) слагаемое, аналогичное (2.2.3) или (2.2.4).

Спиновая переменная принимает два значения, которые мы будем обозначать \uparrow и \downarrow («спин вверх» и «спин вниз»). Введение этой переменной означает, что число орбиталей удваивается: каждая орбиталь помимо номера атома i и типа орбитали α будет характеризоваться одним из двух направлений спина. Вместо каждого слагаемого типа $\epsilon_{i\alpha} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\alpha}$ в (2.2.1) теперь будет подразумеваться $\epsilon_{i\alpha} (\hat{a}_{i\alpha\uparrow}^+ \hat{a}_{i\alpha\uparrow} + \hat{a}_{i\alpha\downarrow}^+ \hat{a}_{i\alpha\downarrow})$, а вместо слагаемых типа $I_{i\alpha,j\beta} \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{j\beta}$ будет $I_{i\alpha,j\beta} (\hat{a}_{i\alpha\uparrow}^+ \hat{a}_{j\beta\uparrow} + \hat{a}_{i\alpha\downarrow}^+ \hat{a}_{j\beta\downarrow})$.

Добавку \hat{H}_{so} к гамильтониану, ответственную за спин-орбитальное взаимодействие, примем, следуя D.J.Chadi [73], в виде суммы по всем атомам, что подразумевает, что спин-орбитальное взаимодействие складывается из независимых взаимодействий спина электрона с орбитальными моментами отдельных атомов:

$$\hat{H}_{so} = \sum_i \hat{H}_{so}^{(i)}, \quad (2.2.5 \text{ а})$$

где каждое из слагаемых $\hat{H}_{so}^{(i)}$ действует только на p -орбитали i -го атома и в базисе

$|p_{x\uparrow}^{(i)}\rangle, |p_{x\downarrow}^{(i)}\rangle, |p_{y\uparrow}^{(i)}\rangle, |p_{y\downarrow}^{(i)}\rangle, |p_{z\uparrow}^{(i)}\rangle, |p_{z\downarrow}^{(i)}\rangle$ равно

$$\hat{H}_{so}^{(i)} = \frac{\Delta}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i\hat{\sigma}_z & i\hat{\sigma}_y \\ i\hat{\sigma}_z & 0 & -i\hat{\sigma}_x \\ -i\hat{\sigma}_y & i\hat{\sigma}_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.2.5 \text{ б})$$

где Δ — величина расщепления валентной зоны в Γ -точке зоны Бриллюэна. Каждая из σ -матриц имеет размерность 2×2 , так что выражение (2.2.5 б) на самом деле является матрицей 6×6 , что соответствует шести p -орбиталям (с учётом спина) на каждом атоме.

Выбор выражения для $\hat{H}_{so}^{(i)}$ в виде (2.2.5 б) можно обосновать следующим образом: s -орбитали обладают нулевым орбитальным моментом и поэтому не принимают участия в спин-орбитальном взаимодействии. Орбитальный момент p -орбиталей равен 1, а оператор орбитального момента $\hat{\mathbf{I}}$ в базисе p_x, p_y, p_z выглядит так ([41], с. 334):

$$\hat{l}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Любую матрицу 6×6 , и в том числе $\hat{H}_{so}^{(i)}$, можно представить в виде функции от операторов орбитального момента $\hat{\mathbf{I}}$ и спина $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$. Оператор $\hat{H}_{so}^{(i)}$ должен быть эрмитовым и обладать инвариантностью относительно преобразований группы T_d , которая является группой симметрии кристаллического поля в окрестности каждого атома. Единственная функция $\hat{\mathbf{I}}$ и

\hat{s} , удовлетворяющая указанным требованиям, — это $A \cdot \hat{\mathbf{I}}\hat{s} + B$, где A и B — константы. Постоянная добавка B для нас не существенна, и её можно отбросить. Остаётся определить константу A . Для этого заметим, что оператор $\hat{\mathbf{I}}\hat{s}$ в случае $l=1, s=\frac{1}{2}$ имеет два собственных значения (см. [32], § 31): $\frac{1}{2}$ (4-кратно вырожденное) и -1 (2-кратно вырожденное). Четырёхкратно вырожденное состояние соответствует лёгким и тяжёлым дыркам в Γ -точке зоны Бриллюэна, а двукратно вырожденное — спин-отщеплённой зоне в Γ -точке. Энергетический зазор между этими состояниями равен $A \cdot (\frac{1}{2} - (-1)) = \frac{3}{2}A$; с другой стороны, он равен Δ . Отсюда $A = \frac{2}{3}\Delta$ и $\hat{H}_{so}^{(i)} = \frac{2\Delta}{3}\hat{\mathbf{I}}\hat{s}$. Подставляя сюда выражения для $\hat{\mathbf{I}}$ и \hat{s} , получим формулу (2.2.5 б).

Для численного решения уравнения Шрёдингера был выбран *метод свободной релаксации*, описанный, например, в § 7.4 книги [74]. Ранее этот метод применялся при изучении наноструктур в работах [75] (для расчёта электронных состояний в гофрированных квантовых ямах GaAs/AlAs) и [76] (для анализа энергетического спектра системы двух дырок в параболическом потенциале).

Метод заключается в том, что решается уравнение $\partial|\psi(\tau)\rangle/\partial\tau|\psi(\tau)\rangle = -\hat{H}|\psi(\tau)\rangle$, где τ — параметр, играющий роль «мнимого времени»: $\tau = it$. В качестве начального условия ($|\psi(0)\rangle$) берется произвольная (заданная случайным образом) волновая функция. В пределе $\tau \rightarrow \infty$ вектор состояния $|\psi(\tau)\rangle$ стремится к собственному состоянию гамильтониана с наименьшей энергией. Для нас представляют интерес состояния, расположенные в определённом интервале энергий (в запрещённой зоне Si). Поэтому мы несколько видоизменили метод решения, следуя идее авторов [77]. Зафиксировав некоторое опорное значение E_{ref} , расположенное внутри запрещённой зоны Si, мы решали уравнение

$\partial|\psi(\tau)\rangle/\partial\tau|\psi(\tau)\rangle = -(\hat{H} - E_{ref})^2|\psi(\tau)\rangle$, что позволило получить энергетический уровень, ближайший к выбранному значению E_{ref} , и соответствующую ему волновую функцию $|\psi\rangle$.

Область кристалла, вовлечённая в вычислительный процесс (рабочая область), имела форму прямоугольного параллелепипеда, содержащего Ge островок. Для типичных размеров Ge квантовой точки ($l=15$ нм, $h=1.5$ нм) размер рабочей области составлял $32\times 32\times 8$ постоянных решётки. Размеры островка составляли приблизительно $28\times 28\times 3$ постоянных решётки.

Представленная здесь sp^3 -модель содержит 15 независимых параметров: это значения энергий s - и p - орбиталей (E_s, E_p); значения энергетических интегралов перекрытия между соседними атомами $ss\sigma, sp\sigma, pp\sigma, pp\pi$ (здесь символы s и p обозначают тип орбитали, а σ и π обозначают тип связи, σ -связь или π -связь), константы $n_{ss\sigma}, n_{sp\sigma}, n_{pp\sigma}, n_{pp\pi}$, описывающие зависимость интегралов перекрытия от деформаций, константы α, β, γ , описывающие деформационное искажение кристаллического поля, равновесная длина связи d_0 и величина спин-орбитального расщепления Δ . Два последних параметра являются экспериментально определяемыми величинами. Остальные представляют собой подгоночные параметры. Значения этих подгоночных параметров модели определяются исходя из известных значений параметров зонной структуры вещества: ширины запрещённой зоны, эффективных масс, констант деформационного потенциала. В таблице 2.2.1 приведены значения параметров, использованных в дальнейших расчетах.

Значения параметров для связи Si-Ge выбраны как промежуточные между их значениями для связей Si-Si и Ge-Ge. В качестве параметров связей Si-Ge были приняты средние арифметические между параметрами Si-Si и Ge-Ge: $ss\sigma(Si-Ge) = \frac{1}{2}[ss\sigma(Si-Si) + ss\sigma(Ge-Ge)]$ и т. п. Равновесная длина связи Si-Ge также взята как среднее арифметическое длин связей Si-Si и Ge-Ge

Таблица 2.2.1. Параметры модели для Si и Ge, использованные при расчёте волновых функций дырок в квантовых точках.

Параметр	Si	Ge
E_s (эВ)	-0.51	-3.32+0.55
E_p (эВ)	0.70	0.89+0.55
$ss\sigma$ (эВ)	-1.03	-1.03
$sp\sigma$ (эВ)	3.01	3.00
$pp\sigma$ (эВ)	1.755	2.42
$pp\pi$ (эВ)	-0.61	-0.84
Δ (эВ)	0.04	0.29
$n_{ss\sigma}$	2.00	2.00
$n_{sp\sigma}$	2.00	2.00
$n_{pp\sigma}$	2.00	1.78
$n_{pp\pi}$	1.37	2.00
β (эВ)	-5.63	-5.89
d (нм)	0.543	0.566

2.3. Метод вычисления g -фактора

Энергетические уровни одной частицы со спином $\frac{1}{2}$ в нулевом магнитном поле всегда вырождены. Это очевидно в ситуации, когда спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь: действительно, состояния с противоположными направлениями спина имеют одинаковую энергию, что обеспечивает, по крайней мере, двукратное вырождение. Спин-орбитальное взаимодействие «перемешивает» спиновую и координатную степени свободы частицы, в результате чего оно, вообще говоря, расщепляет энергетические уровни, т. е. уменьшает кратность вырождения. Однако теорема Крамерса [32, § 60] гарантирует, что даже при наличии спин-орбитального (и спин-спинового) взаимодействия в системе с полуполным полным спином уровни остаются вырожденными, причём кратность вырождения будет чётной. Уровни с кратностью вырождения ≥ 4 появляются только в системах с достаточно высокой симметрией, например, кубической [32, § 99]. Самоформирующиеся квантовые точки не обладают такой симметрией, поэтому в настоящей главе мы ограничимся рассмотрением только *двукратно вырожденных* уровней энергии.

Теорема Крамерса перестаёт выполняться в том случае, когда рассматриваемая система находится во внешнем магнитном поле. Действительно, эта теорема основана на инвариантности гамильтониана относительно обращения времени. Магнитное поле при обращении времени меняет знак², поэтому при наличии магнитного поля гамильтониан не является инвариантным относительно инверсии времени, и условие теоремы Крамерса нарушается. Таким образом, магнитное поле может снимать крамерсовское вырождение, т. е. расщеплять энергетические уровни. Это явление называется *эффектом Зеемана*. В достаточно слабых магнитных полях³ величина зеемановского расщепления пропорциональна напряжённости магнитного поля.

² Например, если магнитное поле создаётся движением зарядов по катушке (соленоиду), то при обращении времени изменится направление движения зарядов. Следовательно, изменится направление электрического тока, и магнитное поле поменяет знак.

³ В таких полях, в которых величина расщепления мала по сравнению с интервалами между энергетическими уровнями.

Количественную характеристику зеемановского расщепления даёт g -фактор, или фактор Ланде. Величина расщепления E_z в магнитном поле H равна

$$E_z = \mu_B g H, \quad (2.3.1)$$

где $\mu_B = e\hbar/2mc = 0.927 \cdot 10^{-20}$ эрг/гаусс — магнетон Бора, g — безразмерная величина, называемая g -фактором. Например, при $g = 2$ расщепление в магнитном поле $H = 1$ Тл составляет $E_z = 1.157 \cdot 10^{-4}$ эВ.

Задача данного параграфа — дать способ вычисления g -фактора для локализованных состояниях дырки в квантовой точке, основанный на приближении сильной связи.

Значение g -фактора можно получить, зная матричные элементы $\langle \psi | \hat{l} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{l} | \chi \rangle$, $\langle \psi | \hat{s} | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{s} | \chi \rangle$ орбитального момента \hat{l} и спина \hat{s} для переходов между двумя состояниями $|\psi\rangle$, $|\chi\rangle$, принадлежащими рассматриваемому двукратно вырожденному уровню. Чтобы убедиться в этом, запишем гамильтониан взаимодействия электрона⁴ с магнитным полем в виде

$$\hat{H}_{\text{магн}} = -\mu_B \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{H}, \quad (2.3.2)$$

где символом $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ обозначен оператор магнитного момента, измеряемого в единицах магнетона Бора. Если векторный потенциал \mathbf{A} выбрать в виде $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{H} \times \mathbf{r}$, где \mathbf{r} — радиус-вектор электрона, то для магнитного момента получим выражение [32, § 113]

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = -(\hat{l} + 2\hat{s}). \quad (2.3.3)$$

Величину расщепления E_z можно получить в первом порядке теории возмущений из решения секулярного уравнения

$$\begin{vmatrix} \langle \psi | \hat{H}_{\text{магн}} | \psi \rangle - E & \langle \psi | \hat{H}_{\text{магн}} | \chi \rangle \\ \langle \chi | \hat{H}_{\text{магн}} | \psi \rangle & \langle \chi | \hat{H}_{\text{магн}} | \chi \rangle - E \end{vmatrix} = 0. \quad (2.3.4)$$

⁴ при описании метода будем пользоваться «электронным языком», т. е. рассматривать состояния в валентной зоне как состояния электронов.

Векторы состояний $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$ предполагаются взаимно ортогональными.

Диагональные матричные элементы $\langle\psi|\hat{H}_{\text{магн}}|\psi\rangle$ и $\langle\chi|\hat{H}_{\text{магн}}|\chi\rangle$ равны по абсолютной величине и противоположны по знаку. Действительно, эти элементы сводятся (согласно (2.3.2), (2.3.3)) к средним значениям орбитального момента l и спина s в состояниях $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$. Так как операция обращения времени переводит состояние $|\psi\rangle$ в ортогональное к нему состояние $|\chi\rangle$, а величины l и s меняют знак при обращении времени, то средние значения этих величин меняют знак при переходе от $|\psi\rangle$ к $|\chi\rangle$. Следовательно, $\langle\chi|\hat{H}_{\text{магн}}|\chi\rangle = -\langle\psi|\hat{H}_{\text{магн}}|\psi\rangle$.

С учётом этого равенства и формулы (2.3.2), уравнение (2.3.4) приводится к виду

$$\begin{vmatrix} -\mu_B H \langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\psi\rangle - E & -\mu_B H \langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\chi\rangle \\ -\mu_B H \langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\chi\rangle^* & \mu_B H \langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\psi\rangle - E \end{vmatrix} = 0,$$

где \mathbf{n} — единичный вектор в направлении магнитного поля. Два корня $E_{1,2}$ этого уравнения

$$E_{1,2} = \pm \mu_B H \sqrt{(\langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\psi\rangle)^2 + |\langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\chi\rangle|^2}. \quad (2.3.5)$$

Зеемановское расщепление E_z равно $E_1 - E_2$. Из сравнения (2.3.1) и (2.3.5) получим

$$|g| = 2\sqrt{(\langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\psi\rangle)^2 + |\langle\psi|\hat{\mathbf{n}}|\chi\rangle|^2}. \quad (2.3.6)$$

Формула (2.3.6) и является искомым выражением g -фактора через матричные элементы магнитного момента, или, согласно (2.3.3), через матричные элементы орбитального момента и спина электрона.

Прежде чем перейти к вычислению этих матричных элементов, рассмотрим зависимость g -фактора от направления магнитного поля. Формулы (2.3.1) и (2.3.6) можно преобразовать к следующему виду ([41], с. 542):

$$\Delta E = \mu_B \sqrt{g_{\alpha\beta}^2 H_\alpha H_\beta}, \quad (2.3.7)$$

где

$$g_{\alpha\beta}^2 = 4 \left(\langle \psi | \hat{\mu}_\alpha | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\mu}_\beta | \psi \rangle + \text{Re} \left(\langle \psi | \hat{\mu}_\alpha | \chi \rangle \langle \chi | \hat{\mu}_\beta | \psi \rangle \right) \right), \quad (2.3.8)$$

α и β — тензорные индексы. Таким образом, вся информация о зависимости g -фактора от направления поля содержится в симметричном тензоре 2-го ранга $g_{\alpha\beta}^2$. Любой такой тензор можно *привести к главным осям*, т. е. выбрать три координатные оси (взаимно перпендикулярные) так, чтобы все недиагональные компоненты тензора обратились в нуль. Диагональные компоненты приведённого к главным осям тензора называются его *главными значениями*. Пусть g_1^2, g_2^2, g_3^2 — главные значения тензора $g_{\alpha\beta}^2$; H_1, H_2, H_3 — проекции вектора \mathbf{H} на главные оси тензора. Тогда

$$\Delta E = \mu_B \sqrt{g_1^2 H_1^2 + g_2^2 H_2^2 + g_3^2 H_3^2}.$$

Обозначим через $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ углы между направлением магнитного поля и тремя главными осями. Тогда $H_1 = H \cos \theta_1$, $H_2 = H \cos \theta_2$, $H_3 = H \cos \theta_3$. В результате получим

$$\Delta E = \mu_B H \sqrt{g_1^2 \cos^2 \theta_1 + g_2^2 \cos^2 \theta_2 + g_3^2 \cos^2 \theta_3}.$$

Следовательно,

$$|g| = \sqrt{g_1^2 \cos^2 \theta_1 + g_2^2 \cos^2 \theta_2 + g_3^2 \cos^2 \theta_3}. \quad (2.3.9)$$

Последняя формула выражает g -фактор для произвольного направления поля через его главные значения g_1, g_2, g_3 .

Направления главных осей тензора $g_{\alpha\beta}^2$, как правило, легко определяются из соображений симметрии. Рассмотрим, например, кластер Ge в форме пирамиды с квадратным основанием. Он имеет следующие элементы симметрии: ось 2-го порядка [001], проходящая через вершину пирамиды и перпендикулярная её основанию; и две плоскости симметрии (110) и ($\bar{1}\bar{1}0$), проходящие через указанную ось и через две диагонали основания пирамиды. Покажем, что главными осями тензора $g_{\alpha\beta}^2$ в таком кластере являются

направления $[001]$ (ось симметрии пирамиды), $[110]$ и $[\bar{1}10]$. Для этого выберем оси x, y, z в направлениях $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$, соответственно. При повороте на 180° вокруг оси z $[001]$ компоненты g_{xz}^2 и g_{yz}^2 меняют знак. При отражении в плоскости xz ($\bar{1}10$) меняет знак компонента g_{xy}^2 . Так как тензор $g_{\alpha\beta}^2$ не должен изменяться под действием преобразований симметрии, то $g_{xy}^2 = g_{xz}^2 = g_{yz}^2 = 0$. Следовательно, три указанных направления действительно являются главными осями этого тензора.

Перейдём к методу вычисления матричных элементов $\langle \psi | \hat{\mu} | \psi \rangle$ и $\langle \psi | \hat{\mu} | \chi \rangle$, где $\hat{\mu} = -(\hat{l} + 2\hat{s})$. Волновые функции $|\psi\rangle, |\chi\rangle$ в приближении сильной связи определены в виде линейных комбинаций атомных орбиталей $|\varphi_{i\alpha}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i\alpha} c_{i\alpha} |\varphi_{i\alpha}\rangle,$$

$$|\chi\rangle = \sum_{i\alpha} \tilde{c}_{i\alpha} |\varphi_{i\alpha}\rangle;$$

здесь индекс i здесь нумерует атомы, а индекс α — типы орбиталей. Коэффициенты разложения $c_{i\alpha}, \tilde{c}_{i\alpha}$ могут быть получены с помощью модели сильной связи; выполняя расчёты энергетического спектра и волновых функций, можно получить и значения этих коэффициентов⁵. Следовательно, вычисление матричных элементов $\langle \psi | \hat{\mu} | \psi \rangle$ и $\langle \psi | \hat{\mu} | \chi \rangle$ сводится к определению матричных элементов типа $\mu_{i\alpha, j\beta} = \langle \varphi_{i\alpha} | \hat{\mu} | \varphi_{j\beta} \rangle$. Или, что эквивалентно, к указанию способа нахождения коэффициентов разложения функции $\hat{\mu} |\psi\rangle$ в базисе атомных орбиталей по заданным коэффициентам разложения функции $|\psi\rangle$.

Атомные орбитали $|\varphi_{i\alpha}\rangle$ можно рассматривать как набор базисных функций некоторого представления, которое, по аналогии с координатным и импульсным

⁵ Достаточно знать только величины $c_{i\alpha}$, так как значения $\tilde{c}_{i\alpha}$ получаются из них посредством крамеровского сопряжения.

представлениями, можно назвать «представлением атомных орбиталей». Тогда задачу о вычислении величин $\mu_{i\alpha,j\beta}$ можно понимать как задачу нахождения оператора $\hat{\mu}$ «в представлении атомных орбиталей». Действительно, величины $\mu_{i\alpha,j\beta}$ как раз и являются матричными элементами, определяющими вид оператора $\hat{\mu}$ в указанном представлении.

Для решения этой задачи начнем с гамильтониана электрона в приближении эффективной массы, а затем совершим переход к приближению сильной связи. Без магнитного поля этот гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = H_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}) + U(\mathbf{r}), \quad (2.3.10)$$

в магнитном поле выражение (2.3.10) изменяется в двух отношениях: во-первых, оператор $\hat{\mathbf{k}}$ заменяется на $\hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}$, где \mathbf{A} — векторный потенциал; во-вторых, к гамильтониану добавляется слагаемое \hat{H}_{spin} , пропорциональное магнитному полю и зависящее от эффективного спина \mathbf{J} .

Изменение гамильтониана под действием магнитного поля равно:

$$H_{\mathbf{k}}\left(\hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}\right) - H_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}) + \hat{H}_{spin}(\hat{\mathbf{J}}, \mathbf{H}).$$

С другой стороны, оно равно (в слабых полях) $-\mu_B \hat{\mu} \mathbf{H}$.

Таким образом, оператор $\hat{\mu}$ в приближении эффективной массы определяется из равенства

$$-\mu_B \hat{\mu} \mathbf{B} = H_{\mathbf{k}}\left(\hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}\right) - H_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}) + \hat{H}_{spin} + O(H^2).$$

Отсюда

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_{orb} + \hat{\mu}_{spin}, \quad (2.3.11)$$

где

$$\hat{\mu}_{orb} = -\frac{1}{\mu_B} \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}} \left[H_{\mathbf{k}}\left(\hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}\right) \right] \quad (2.3.12)$$

— вклад орбитального движения, связанного с огибающей волновой функцией, в магнитный момент

$$\hat{\mu}_{spin} = -\frac{1}{\mu_B} \frac{\partial \hat{H}_{spin}}{\partial \mathbf{H}} \quad (2.3.13)$$

— вклад, связанный с эффективным спином.

Теперь, имея операторы $\hat{\mu}_{orb}$ и $\hat{\mu}_{spin}$, в приближении эффективной массы выполним переход к приближению сильной связи, т. е. найдём выражения для $\hat{\mu}_{orb}$ и $\hat{\mu}_{spin}$ «в представлении атомных орбиталей», переходящие в макроскопическом пределе в (2.3.12) и (2.3.13).

Заметим, прежде всего, что оператор $\hat{\mu}_{spin}$ уже имеет требуемый вид, т. е. он не нуждается ни в каком видоизменении. Действительно, $\hat{\mu}_{spin}$ зависит только от эффективного спина и от номера подзоны. Эффективный спин — это величина, характеризующая трансформационные свойства блоховских функций, составленных из орбиталей, и поэтому оператор эффективного спина наиболее просто выражается в представлении атомных орбиталей. Для определения номера подзоны можно использовать проекционные операторы, выделяющие ту или иную подзону.

Построим выражение для $\hat{\mu}_{spin}$ в sp^3 -модели. Для этого в нашем распоряжении имеются операторы — эффективный спин $\hat{\mathbf{J}}$ и проекционные операторы, выделяющие зону проводимости (\hat{P}_s), спин-отщеплённую ветвь валентной зоны (\hat{P}_{so}) и подзону лёгких и тяжёлых дырок ($\hat{P}_{lh, hh}$).

Все перечисленные проекционные операторы можно выразить через \hat{P}_s и $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\hat{P}_{so} = (1 - \hat{P}_s)(1 - \hat{P}_{J=3/2}),$$

$$\hat{P}_{lh, hh} = (1 - \hat{P}_s)\hat{P}_{J=3/2},$$

$$\text{где } \hat{P}_{J=3/2} = (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 - \frac{3}{4})/3.$$

Подзону лёгких и тяжёлых дырок можно разделить с помощью проекционных операторов $P_{\pm 3/2}$ и $P_{\pm 1/2}$, первый из которых обращает в нуль компоненты волновой функции с $J_z = \pm 1/2$ и не влияет на компоненты с $J_z = \pm 3/2$, а второй — наоборот. Эти проекционные операторы являются комбинациями оператора спина s и углового момента l :

$$P_{\pm 3/2} = ((s_z + l_z)^2 - 1/4)/2, \quad P_{\pm 1/2} = 1 - P_{\pm 3/2}.$$

Оператор \hat{P}_s легко записывается в представлении атомных орбиталей — он имеет диагональный вид, причём диагональные матричные элементы, относящиеся к s -орбиталям, равны 1, а все прочие равны 0. Эффективный спин $\hat{\mathbf{J}}$ в sp^3 -модели равен сумме «настоящего» спина $\hat{\mathbf{s}}$ и углового момента, связанного со структурой атомных орбиталей, $\hat{\mathbf{l}}_1$. В предыдущем параграфе приведена матричная запись для $\hat{\mathbf{l}}_1$ в базисе атомных орбиталей; оператор спина $\hat{\mathbf{s}}$ сводится к σ -матрицам ($\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$) в том же базисе. Следовательно, эффективный спин и все рассмотренные проекционные операторы достаточно просто выражаются в представлении атомных орбиталей.

Чтобы выразить $\hat{\boldsymbol{\mu}}_{spin}$ через $\hat{\mathbf{J}}$ и проекционные операторы, рассмотрим действие магнитного поля на свободные носители. В Γ -точке валентной зоны (подзоны тяжёлых и лёгких дырок) \hat{H}_{spin} имеет вид

$$2k\mu_B (\hat{J}_x H_x + \hat{J}_y H_y + \hat{J}_z H_z) + 2q\mu_B (\hat{J}_x^3 H_x + \hat{J}_y^3 H_y + \hat{J}_z^3 H_z),$$

где H_x, H_y, H_z — компоненты магнитного поля; коэффициенты k и q называются параметрами Латтинжера (см. [41], с. 325). Отсюда получаем для лёгких и тяжёлых дырок:

$$\hat{\mu}_{spin,x} = -2k\hat{J}_x - 2q\hat{J}_x^3 \quad (2.3.14 \text{ а})$$

и аналогично для y, z -компонент.

В Γ -долине зоны проводимости взаимодействие с магнитным полем имеет более простой вид:

$$\hat{H}_{spin} = \mu_B g_c \hat{\mathbf{J}} \mathbf{H},$$

откуда

$$\hat{\mu}_{spin,x} = -g_c \hat{J}_x. \quad (2.3.14 \text{ б})$$

Здесь g_c — g -фактор электрона в Γ -долине.

Аналогично для отщеплённой спин-орбитальным взаимодействием ветви валентной зоны имеем

$$\hat{\mu}_{spin,x} = -g_{so} \hat{J}_x, \quad (2.3.14 \text{ в})$$

где g_{so} — g -фактор дырки в этой подзоне.

Если же волновая функция содержит вклады всех упомянутых подзон, то оператор $\hat{\mu}_{spin,x}$ будет суммой выражений (2.3.14 а–в), взятых с соответствующими весами. Эти веса задаются проекционными операторами $\hat{P}_{lh,hh}$, \hat{P}_s , \hat{P}_{so} . Таким образом, окончательное выражение таково:

$$\hat{\mu}_{spin,x} = -\hat{P}_{lh,hh} (2k\hat{J}_x + 2q\hat{J}_x^3) - g_c \hat{P}_s \hat{J}_x - g_{so} \hat{P}_{so} \hat{J}_x \quad (2.3.15)$$

и аналогично для y, z -компонент. Формула (2.3.15) вместе с рассмотренными выше выражениями для $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{P}_{lh,hh}$, \hat{P}_s , \hat{P}_{so} определяет оператор $\hat{\mu}_{spin}$ sp^3 -модели в представлении атомных орбиталей.

Перейдём к нахождению «орбитального» вклада в магнитный момент, $\hat{\mu}_{orb}$. Для этого рассмотрим переход от формулы (2.3.3):

$$\hat{\mu} = -(\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}),$$

к (2.3.11):

$$\hat{\mu} = \hat{\mu}_{orb} + \hat{\mu}_{spin}.$$

Слагаемое $-2\hat{s}$ в первой формуле целиком войдёт в $\hat{\mu}_{spin}$, так как оно не имеет отношения к орбитальному движению. С другой стороны, слагаемое $-\hat{l}$ распределяется между $\hat{\mu}_{orb}$ и $\hat{\mu}_{spin}$. Действительно, орбитальный момент \hat{l} содержит вклады, происходящие от движения электрона вокруг ядра (этот вклад определяется типом атомной орбитали) и от движения электрона от атома к атому (определяющийся огибающей волновой функцией).

Обозначим их через \hat{l}_1 и \hat{l}_2 соответственно:

$$\hat{l} = \hat{l}_1 + \hat{l}_2.$$

Слагаемое \hat{l}_1 , не зависящее от огибающей волновой функции, войдёт (с обратным знаком) в $\hat{\mu}_{spin}$:

$$\hat{\mu}_{spin} = -(\hat{l}_1 + 2\hat{s}).$$

Аналогично $\hat{\mu}_{orb}$ образуется из слагаемого \hat{l}_2 :

$$\hat{\mu}_{orb} = -\hat{l}_2.$$

Таким образом, для нахождения g -фактора осталось выделить из орбитального момента электрона слагаемое \hat{l}_2 , соответствующее огибающей волновой функции, и выразить его в представлении атомных орбиталей.

Эта последняя задача может быть решена следующим способом. В формуле, представляющей собой определение орбитального момента:

$$\hat{l} = \frac{1}{\hbar} \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = \frac{m}{\hbar} \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{v}},$$

выразим оператор скорости $\hat{\mathbf{v}}$ через гамильтониан \hat{H} и радиус-вектор электрона $\hat{\mathbf{r}}$ согласно правилу дифференцирования операторов по времени ([32], § 9):

$$\hat{\mathbf{v}} \equiv \hat{\dot{\mathbf{r}}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H})$$

(здесь m — масса *свободного* электрона). Получим

$$\hat{l} = \frac{im}{\hbar^2} \hat{\mathbf{r}} \times (\hat{H} \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}) = \frac{im}{\hbar^2} \hat{\mathbf{r}} \times (\hat{H} \hat{\mathbf{r}}).$$

В частности, для z -компоненты

$$\hat{l}_z = \frac{im}{\hbar^2} (\hat{x} \hat{H} \hat{y} - \hat{y} \hat{H} \hat{x}). \quad (2.3.16)$$

Введём оператор «радиус-вектора атомной орбитали» $\hat{\mathbf{R}}$ следующим образом:

$$\hat{\mathbf{R}} = \sum_{i\alpha} \mathbf{R}_i \hat{a}_{i\alpha}^+ \hat{a}_{i\alpha},$$

где \mathbf{R}_i — радиус-вектор i -го атома. Действие оператора $\hat{\mathbf{R}}$ на волновую функцию, выраженную в приближении сильной связи,

$$|\psi\rangle = \sum_{i\alpha} c_{i\alpha} |\varphi_{i\alpha}\rangle,$$

определяется так:

$$\hat{\mathbf{R}}|\psi\rangle = \sum_{i\alpha} \mathbf{R}_i c_{i\alpha} |\varphi_{i\alpha}\rangle.$$

Компоненты вектора $\hat{\mathbf{R}}$ будем обозначать заглавными буквами $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$.

Заменяем теперь в правой части равенства (2.3.16) операторы \hat{x}, \hat{y} координат частицы на \hat{X}, \hat{Y} . Такая замена эквивалентна отбрасыванию слагаемого \hat{l}_1 , связанного со структурой атомных орбиталей. Действительно, если «выключить» движение электрона от атома к атому, обратив в нуль интегралы перекрытия между орбиталями, принадлежащими различным атомам, то выражение

$$\frac{im}{\hbar^2} (\hat{X} \hat{H} \hat{Y} - \hat{Y} \hat{H} \hat{X}) \quad (2.3.17)$$

тождественно обратится в нуль. Это ясно из того, что все операторы $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{H}$ имеют диагональный вид в представлении атомных орбиталей (если \hat{H} не содержит межатомных интегралов перекрытия), а значит, попарно коммутируют. Следовательно, \hat{l}_1 не даёт вклада в выражение (2.3.17).

С другой стороны, величина разности $\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{R}}$ не превышает размеров атомных орбиталей, т. е. мала по сравнению с характерным масштабом огибающей волновой функции. Поэтому вклад в угловой момент, связанный с огибающей, не должен существенно измениться при замене $\hat{\mathbf{r}}$ на $\hat{\mathbf{R}}$.

Можно, следовательно, сделать вывод, что выражение (2.3.17) равно $\hat{l}_{2,z}$ — компоненте вклада огибающей функции в угловой момент. В результате получаем для $\hat{\mu}_{orb,z}$:

$$\hat{\mu}_{orb,z} = -\hat{l}_{2,z} = -\frac{im}{\hbar^2} (\hat{X} \hat{H} \hat{Y} - \hat{Y} \hat{H} \hat{X}). \quad (2.3.18 \text{ а})$$

Циклическая перестановка координат x, y, z в (2.18 а) даёт выражения для x, y -компонент вектора $\hat{\mu}_{orb}$. Общая формула для всех трёх компонент выглядит так:

$$\hat{\mu}_{orb,\alpha} = -\frac{im}{\hbar^2} e_{\alpha\beta\gamma} \hat{R}_\beta \hat{H} \hat{R}_\gamma, \quad (2.3.18 \text{ б})$$

где α, β, γ — тензорные индексы, $e_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор.

Окончательное выражение для оператора магнитного момента $\hat{\mu}$ в представлении атомных орбиталей получим, объединяя формулы (2.11), (2.15) и (2.18). Для z -компоненты оно имеет вид

$$\hat{\mu}_z = -\left(2k \hat{P}_{lh,hh} + g_c \hat{P}_s + g_{so} \hat{P}_{so}\right) \hat{J}_z - 2q \hat{P}_{lh,hh} \hat{J}_z^3 - \frac{im}{\hbar^2} (\hat{X} \hat{H} \hat{Y} - \hat{Y} \hat{H} \hat{X}). \quad (2.3.19)$$

Производя циклическую перестановку координат в (2.19), получим выражения для $\hat{\mu}_x, \hat{\mu}_y$.

Подведём итоги. Для вычисления g -фактора некоторого двукратно вырожденного уровня описанным здесь методом нужно, прежде всего, иметь собственный вектор (волновую функцию) $|\psi\rangle$, соответствующий этому уровню. Собственный вектор определяется из уравнения Шрёдингера

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle,$$

где \hat{H} — гамильтониан модели сильной связи. Для решения уравнения можно использовать, например, релаксационный метод. Вектор $|\psi\rangle$ выражен в представлении атомных орбиталей, т. е. известны коэффициенты $c_{i\alpha}$ его разложения по орбиталям $|\varphi_{i\alpha}\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{i\alpha} c_{i\alpha} |\varphi_{i\alpha}\rangle.$$

Крамеровское сопряжение вектора $|\psi\rangle$ даёт второй собственный вектор $|\chi\rangle$.

Затем, действуя оператором магнитного момента $\hat{\mu}$ на $|\psi\rangle$ и $|\chi\rangle$, вычисляются матричные элементы $\langle\psi|\hat{\mu}|\psi\rangle$ и $\langle\psi|\hat{\mu}|\chi\rangle$. Так как оператор $\hat{\mu}$, определяемый формулами (2.3.19), выражается через операторы $\hat{\mathbf{J}}$, $\hat{P}_{lh,hh}$, \hat{P}_s , \hat{P}_{so} , $\hat{\mathbf{R}}$, \hat{H} , имеющие простой вид в представлении атомных орбиталей, то вычисление указанных матричных элементов не представляет труда.

Зная матричные элементы, можно вычислить g -фактор для произвольного направления магнитного поля по формуле (2.3.6), или тензор g -фактора по формуле (2.3.8).

В следующем параграфе развитый здесь метод применяется к вычислению g -фактора дырки, локализованной в квантовой точке Ge/Si.

2.4. g -фактор дырок в Ge/Si квантовых точках

Для вычисления g -фактора применялась стандартная модель квантовых точек, принятая в данной работе. Квантовая точка рассматривалась как Ge пирамида с квадратным основанием в плоскости (100) и боковыми гранями {105}, расположенная поверх Ge плёнки толщиной 5 монослоёв (≈ 0.7 нм). Сверху и снизу пирамида окружена кремнием. Вершина пирамиды лежит на оси симметрии кристаллической решётки [001] (ось 2-го порядка); через эту ось проходят две плоскости симметрии: (110) и ($\bar{1}10$). Симметрия такой квантовой точки описывается группой C_{2v} , содержащей две перпендикулярные плоскости симметрии и ось 2-го порядка.

Как уже обсуждалось в предыдущем параграфе, в этом случае главные оси тензора g -фактора можно определить из соображений симметрии. Главными осями являются направления [110], [$\bar{1}10$] (в плоскости основания Ge пирамиды) и [001] (в направлении роста структуры, перпендикулярном к плоскости основания). Выберем эти направления в качестве координатных осей x , y и z , соответственно. Тогда, согласно (2.3.9), значение g -фактора для произвольного направления магнитного поля равно

$$\sqrt{g_x^2 \cos^2 \theta_x + g_y^2 \cos^2 \theta_y + g_z^2 \cos^2 \theta_z},$$

где $\cos \theta_x, \cos \theta_y, \cos \theta_z$ — направляющие косинусы вектора магнитного поля относительно осей x, y, z ; g_x, g_y и g_z — главные значения g -фактора в направлении осей x, y и z .

Чтобы вычислить g_x, g_y и g_z по формулам (2.3.6) и (2.3.19), нужно знать гамильтониан \hat{H} , волновую функцию $|\psi\rangle$, а также параметры k, q, g_{so}, g_c для кремния и германия. Значения параметров приведены в таблице 2.4.1. В литературе нет данных по g_{so} и g_c в кремнии; мы приняли эти величины равными 2.0, т. е. близкими к g -фактору свободного электрона. Основное влияние на результирующее значение g -фактора оказывает параметр Латтинжера k . Для чистого ненапряженного Ge этот параметр равен $k=3.41$ [78].

Данный параметр определяется **кр**-взаимодействием верхней валентной зоны с *s* и *p* антисвязывающими состояниями зоны проводимости, расположенными на расстоянии E_0 и E'_0 соответственно. Для края валентной зоны Дрессельхауз, Кип и Киттель ввели параметры [79]:

$$F = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_x | \Gamma'_{12}, j \rangle|^2}{E_j}, \quad G = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_x | \Gamma'_{12}, j \rangle|^2}{E_j},$$

$$H_1 = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_y | \Gamma'_{15}, j \rangle|^2}{E_j}, \quad H_2 = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_y | \Gamma'_{25}, j \rangle|^2}{E_j},$$

через которые можно выразить параметры Латтинжера, и в частности k . Здесь $|X\rangle$ - волновая функция (yz) состояний Γ'_{25} .

$$k = -\frac{1}{6}(F - G - H_1 + H_2) - \frac{1}{3} - \frac{9}{4}q.$$

Для учета изменения k связанного с напряжениями в Ge была использована интерполяционная схема, предложенная в работе [80] для расчета параметров Латтинжера в $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ твердых растворах. На рисунке 2.4.1 показано изменение параметра Латтинжера в твердом растворе $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ в зависимости от содержания Si, полученное в этой работе [80]. Мы предположили, что данная схема будет работать и в случае перехода от ненапряжённого к напряжённому Ge. Параметр k в данной схеме выражен следующим образом:

$$k = \frac{1}{6} \frac{E_p}{E_0} - \frac{1}{6} \frac{E_p'}{E_0'} + \bar{k}.$$

Значения E_p , E_p' с точностью до множителя $2/m$ совпадают с F и H_1 , значение \bar{k} выражается через G и H_2 . Для ненапряженного Ge известны значения $E_0 = 0.89$ эВ, $E_0' = 3.16$ эВ, $E_p = 26.3$ эВ, $E_p' = 17.8$ эВ [81]. Можно найти значение $\bar{k} = -0.58$, приняв $k = 3.41$.

Далее изменение параметров E_0 , E_0' , E_p , E_p' для напряженного Ge можно получить, используя зависимости от постоянной решетки, предложенные Лаватц в работе [81]:

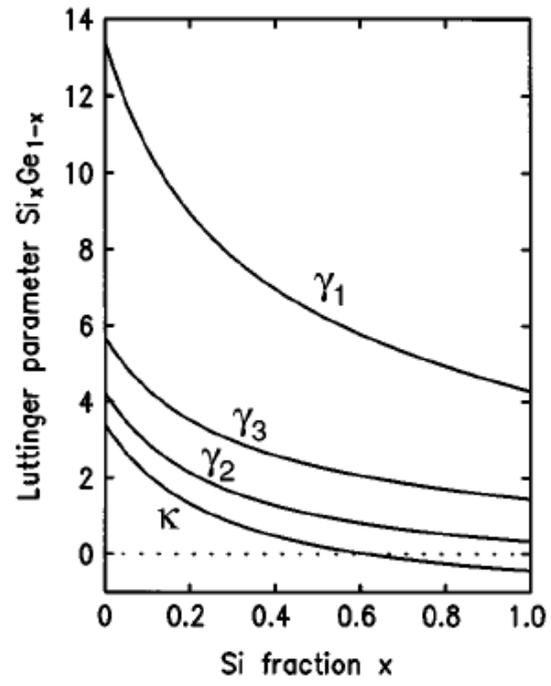


Рис.2.41. Изменение параметров Латтинжера в твердом растворе $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ в зависимости от содержания Si, полученное в работе [80]

$$E_0' = E_0'(Ge) \left[\frac{a(Ge_{str})}{a(Ge)} \right]^{-1.92},$$

$$\begin{aligned} E_p &= E_p(Ge) \cdot \delta, \\ E_p' &= E_p'(Ge) \cdot \delta, \end{aligned} \quad \text{где } \delta = (1 + 1.23[D(Ge_{str}) - 1]) \left[\frac{a(Ge)}{a(Ge_{str})} \right]^2.$$

Параметр $D(Ge_{str})$ был введен в работе [82] для учета влияния d -электронов. Его изменение в напряженном Ge найдено с помощью метода, предложенного Ван Вехтенем [82], $D(Ge_{str})=1.13$.

Изменение энергетического зазора E_0 за счет напряжений мы оценили, следуя Ван де Валле [66], $E_0=1.2$ эВ.

Используя вышеперечисленные формулы, мы оценили величину параметра Латтинжера k для напряженного Ge $k \approx 2.75$ (изменение длины связи было положено $\frac{a(Ge) - a(Ge_{str})}{a(Ge)} \approx 0.02$, оценка на основе величины гидростатического сжатия в области локализации основного дырочного состояния).

Мы ограничимся рассмотрением g -фактора дырки в основном состоянии в Ge квантовой точке. Возбуждённые состояния одной дырки здесь не рассматриваются, хотя в принципе данный метод позволяет рассчитать g -фактор и для них. Для типичной квантовой точки, имеющей латеральный размер 15 нм и высоту 1.5 нм, получены следующие главные значения g -фактора в основном состоянии дырки (см. рис. 2.4.2)

$$g_x=0.69, g_y=1.59, g_z=12.28.$$

Сильная анизотропия g -фактора напрямую связана с геометрией квантовой точки. Поскольку Ge квантовая точка является квазидвумерным объектом (высота на порядок меньше её латерального размера), то можно провести некую связь с двумерными объектами. Основное состояние в квантовой точке близко по своей структуре к состоянию с угловым моментом $\mathbf{J}=3/2$ и его проекцией на ось симметрии Z квантовой точки $J_z=\pm 3/2$ (~84%) [51]. В двумерном случае (например, квантовая яма Ge/SiGe, Z – ось квантования) это состояние

Таблица 2.4.1. Список параметров.

Параметр	Si	Ge
k	0.42 ^(a)	-2.75 ^(e)
q	-0.01 ^(a)	-0.06 ^(c)
g_{so}	2.0 ^(b)	-10.0 ^(d)
g_c	2.0 ^(b)	-3.0 ^(d)

Примечания:

(a) Ссылка [78].

(b) Использовано значение g -фактора свободного электрона.

(c) Ссылка [83].

(d) Ссылка [84].

(e) Ссылка [51].

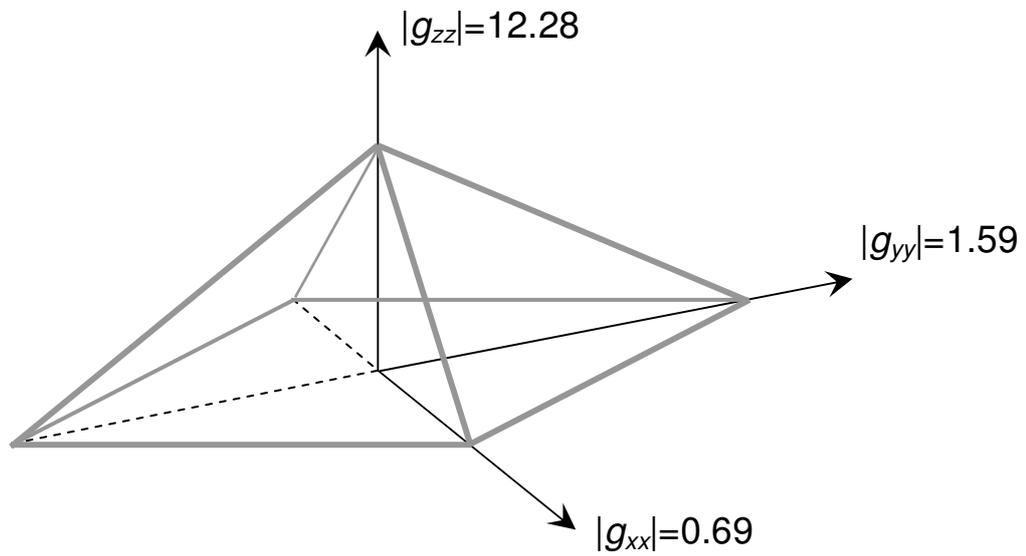


Рис. 2.4.2 Главные значения g -фактора основного состояния дырки в пирамидальной квантовой точке Ge/Si с латеральным размером 15 нм и высотой 1.5 нм. Оси x , y , z соответствуют направлениям $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$

$|J = 3/2, J_z = \pm 3/2\rangle$ соответствует состоянию тяжёлой дырки. У тяжёлой дырки продольный g -фактор (в направлении оси Z , оси квантования) равен $6k$, что составляет ~ 20 в Ge, а поперечный g -фактор имеет релятивистскую малость и определяется константой q . Поэтому анизотропия g -фактора объясняется близостью основного дырочного состояния в Ge КТ к состоянию тяжёлой дырки.

Далее для удобства изложения мы будем называть состояние с угловым моментом $J=3/2$ и его проекцией на ось симметрии Z квантовой точки $J_z=\pm 3/2$ состоянием тяжёлой дырки, а состояние с $J_z=\pm 1/2$ – состоянием лёгкой дырки.

2.5 Зависимость g -фактора от размера Ge квантовой точки

При увеличении размера основания островка анизотропия g -фактора увеличивается (рис.2.5.1). Чтобы понять эту тенденцию, необходимо рассмотреть изменение структуры волновой функции в зависимости от размера квантовой точки. Можно предположить, что увеличение анизотропии g -фактора вызвано тем, что волновая функция основного состояния при увеличении размеров островка всё больше приобретает характер волновой функции тяжёлой дырки.

Действительно, по нашим расчётам при увеличении размера островка в латеральном направлении вклад состояния с $J_z=\pm 3/2$ в волновую функцию дырки возрастает, и характер волновой функции стремится к чистому состоянию $|3/2, \pm 3/2\rangle$ (рис.2.5.2). Например, для высоты островка $h=1.5$ нм при увеличении латерального размера l от 15 нм до 30 нм вклад компоненты $|\pm 3/2\rangle$ в волновую функцию основного состояния возрастает с 83% до 86%. Анизотропия g -фактора увеличивается: значение g_{zz} возрастает до 13.53, а поперечные компоненты уменьшаются до $g_{xx}=0.52$, $g_{yy}=1.56$.

Если увеличивать островок, сохраняя пропорции ($h/l=1/10$), то есть увеличивать дополнительно высоту пирамиды, то анизотропия g -фактора ещё больше возрастает.

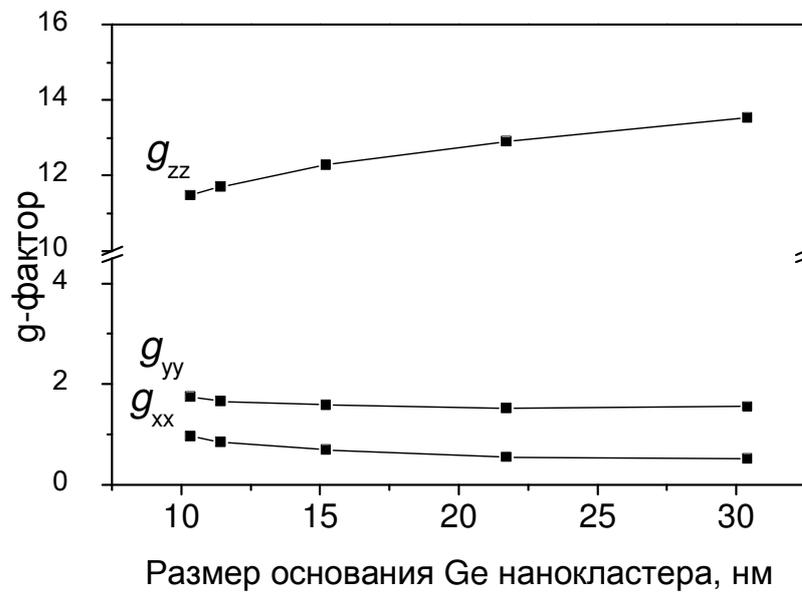


Рис. 2.5.1. Зависимость от латерального размера Ge островка продольной и поперечных компонент g-фактора дырки в основном состоянии. Высота островка $h=1.5$ нм.

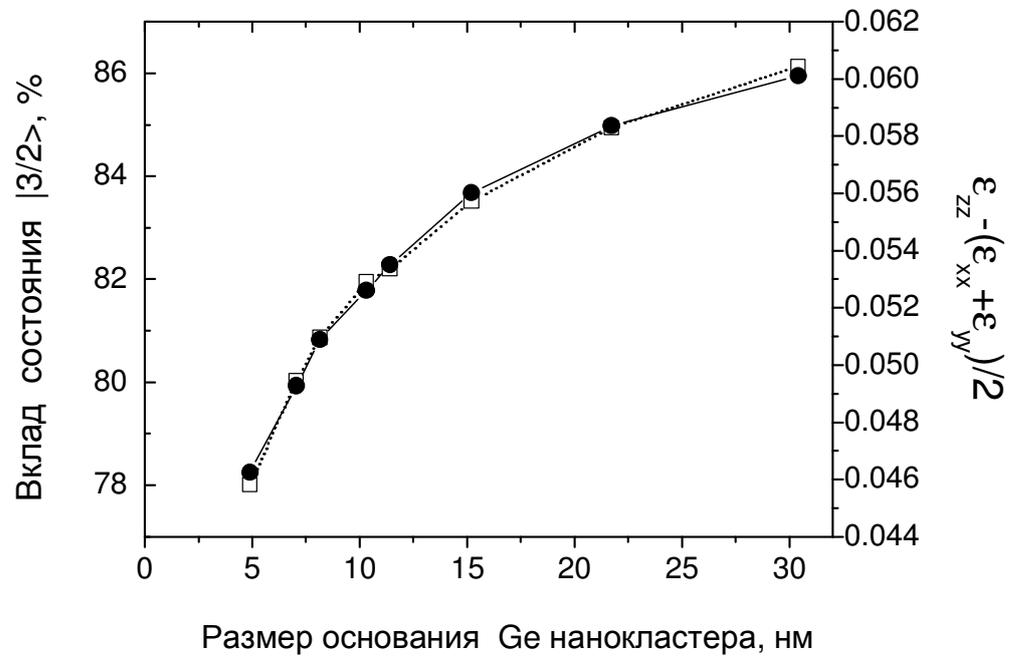


Рис. 2.5.2 Зависимость вклада компоненты $|3/2\rangle$ в волновую функцию основного состояния дырки от латерального размера Ge островка ($h=1.5$ нм). Для сравнения приведено изменение максимального значения биаксиальной деформации в области локализации дырки.

Например, для $l=30$ нм, $h=3$ нм главные значения g -фактора следующие: $g_{zz}=17.43$, $g_{xx}=0.12$, $g_{yy}=1.06$. Оказывается, что в этом случае вклад компоненты $|\pm 3/2\rangle$ в волновую функцию основного состояния возрастает до 90%, что и приводит к такой высокой анизотропии. Чтобы установить причины увеличения вклада компоненты $|\pm 3/2\rangle$ в волновую функцию основного состояния мы проанализировали, как меняются упругие деформации внутри Ge квантовой точки с увеличением латерального размера. Мы построили зависимость биаксиальной деформации $\varepsilon_{zz}-1/2(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy})$ от латерального размера квантовой точки (рис.2.5.2). При увеличении размера квантовой точки величина биаксиальной деформации в центре квантовой точки увеличивается. Это ведет к увеличению расщепления между подзонами тяжёлых и лёгких дырок [66]. Степень подмешивания состояний с $J_z=1/2$ (состояний лёгкой дырки) уменьшается. Характер основного состояния становится ближе к состоянию тяжёлой дырки. Более того, построенная нами зависимость биаксиальной деформации практически совпадает с зависимостью вклада состояния с $J_z=3/2$, что является неожиданным результатом, свидетельствующим о том, что вклад состояния с $J_z=3/2$ является практически линейной функцией биаксиальной деформации в рассматриваемом диапазоне размеров квантовой точки.

Если говорить о зависимости от размеров при увеличении квантовой точки с сохранением пропорций, то в данном случае биаксиальная деформация не может влиять на вклад состояния с $J_z=3/2$, поскольку в данном случае она практически не меняется. Здесь играет роль увеличение зазора между подзонами тяжёлых и лёгких дырок за счёт квантово-размерного фактора. Чтобы понять это, нужно рассмотреть квантование отдельно для тяжёлой дырки и для лёгкой дырки (рис.2.5.3). А затем по теории возмущения включить взаимодействие между ними. То есть рассмотреть формирование энергетического спектра в приближении слабо-взаимодействующих подзон. Увеличение основного квантующего размера – высоты КТ ведёт к сдвигу всех уровней квантования. Однако уровни квантования тяжёлой дырки сдвигаются сильнее, чем уровни квантования лёгкой дырки, так как

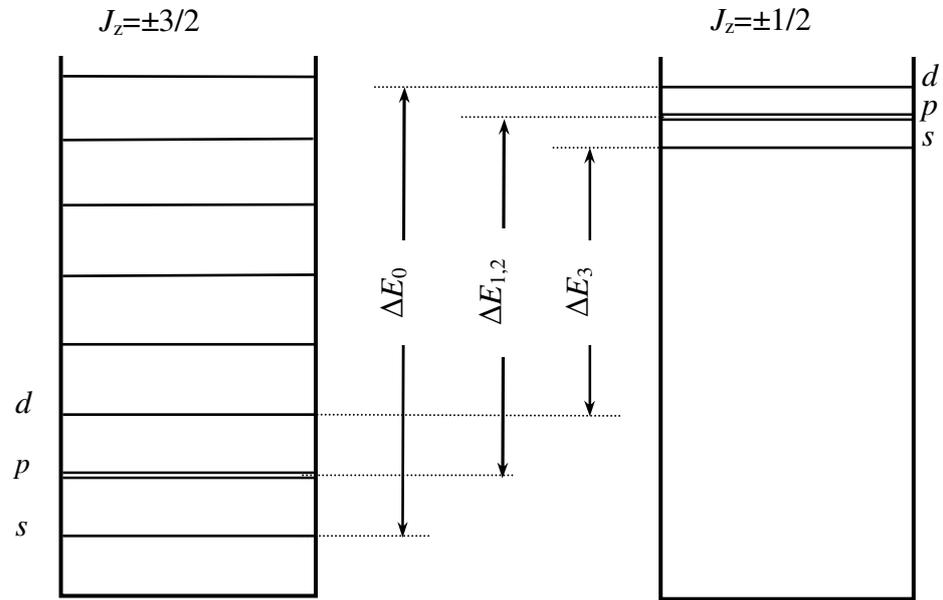


Рис. 2.5.3. Схематическое изображение энергетического спектра дырок в Ge квантовой точке в модели слабо взаимодействующих подзон. Согласно расчётам в формировании основного дырочного состояния участвуют s -состояние тяжёлой дырки и d -состояние лёгкой дырки, в формировании первого и второго возбуждённых состояний участвуют p -состояния тяжёлой и лёгкой дырки, в формировании третьего возбуждённого состояния – s -состояние лёгкой дырки и d -состояние, тяжёлой дырки. На рисунке указаны энергетические зазоры между взаимодействующими состояниями тяжёлой и лёгкой дырки.

волновые функции лёгкой дырки имеют большой радиус локализации и менее чувствительны к изменению размера квантовой точки. Зазор между уровнями тяжёлой и лёгкой дырки увеличивается, что приводит к уменьшению вклада лёгкой дырки.

Таким образом, и в этом случае состояние в квантовой точке стремится к состоянию тяжёлой дырки, что и объясняет возрастание анизотропии g-фактора.

Учёт размытия границ Ge островка.

Вышеприведенные значения g-фактора были получены для островка с резкими границами. Если учесть диффузионное размытие границ островка, которое присутствует в реальных Ge островках, то эти значения несколько изменятся. Размытие границ учитывалось следующим образом: каждый атом кристаллической решётки с вероятностью $2/3$ заменялся на одного из его ближайших четырёх соседей. В результате получалась граница с плавным изменением состава вещества в пределах трёх монослоёв. Расчёт с учётом размытия границ островка дал следующие результаты: сильное изменение претерпели поперечные компоненты g-фактора, например, для островка с латеральным размером 15 нм $|g_{xx}|$ уменьшился с 0.69 до 0.6, а $|g_{yy}|$ - с 1.59 до 0.33. Продольная же компонента g-фактора практически не изменилась и составила $|g_{zz}|=12.37$. То есть мы видим, что анизотропия g-фактора возрастает при учёте размытия границ островка. Возможно, это связано с эффективным увеличением размеров островка.

2.6 Обсуждение экспериментальных возможностей измерения

g-фактора дырок в Ge/Si КТ.

Основным экспериментальным методом получения значений g-фактора носителей в полупроводниках является метод ЭПР. В эксперименте регистрируется поглощение СВЧ-излучения на переходах между зеемановскими подуровнями в магнитном поле. Положение регистрируемой линии поглощения определяется g-фактором, а ширина линии зависит либо от времени спиновой релаксации T_2 (в случае однородно-уширенной линии), либо от

разброса g -факторов исследуемых центров (в случае неоднородно-уширенной линии). Обсудим возможность применения ЭПР для исследования дырочных состояний в Ge/Si КТ.

Вероятности зеемановских переходов

Вероятность индуцированных переходов между двумя уровнями, относящимися к одному и тому же зеемановскому дублету, в магнитном поле является одним из параметров, определяющих чувствительность метода ЭПР. Рассмотрим зависимость вероятности перехода от направления магнитного поля и поляризации электромагнитной волны.

Эти переходы являются магнито-дипольными, изменение проекции магнитного момента на направление магнитного поля в таких переходах равно $\Delta M_z = \pm 1$ (для начала рассмотрим случай магнитного поля $\mathbf{H} \parallel Z$). Приняв во внимание результаты разложения волновой функции основного дырочного состояния (близость к состоянию с $J_z = \pm 3/2$), можно сразу сказать, что такие переходы будут подавлены, так как для переворота спина необходим переход из состояния с $J_z = +3/2$ в состояние $J_z = -3/2$ и требуется изменение $\Delta M_z = \pm 3$. Однако, поскольку в состав дырочного состояния входит также и компонента с $J_z = \pm 1/2$ то запрет на зеемановские переходы будет не столь жёстким, и вероятность переходов будет зависеть от вклада компоненты с $J_z = \pm 1/2$. При отклонении внешнего магнитного поля от направления оси симметрии Z картина существенно меняется. Рассмотрим крайний случай, когда магнитное поле лежит в плоскости основания квантовой точки и параллельно оси X . Теперь главную роль играет проекция магнитного момента M_x , и дырочное состояние характеризуется проекцией углового момента на ось X , то есть J_x . Для переворота спина необходим переход из состояния с J_x в состояние с $-J_x$.

Следует отметить, что в этом случае направление магнитного поля не совпадает с осью симметрии квантовой точки Z (направлением роста $[001]$), и состояние с $J_x = \pm 3/2$ уже нельзя связывать с состоянием тяжёлой дырки, а состояние с $J_x = \pm 1/2$ – с состоянием лёгкой дырки.

Вектор состояния, характеризующегося проекцией момента на ось X, $|J, J_x\rangle$, легко получить с помощью матрицы поворота, переводящей состояние, характеризующееся проекцией момента на ось Z $|J, J_z\rangle$, в состояние, характеризующееся проекцией момента на некоторую ось h $|J, J_h\rangle$:

$$|J, J_z\rangle \rightarrow |J, J_x\rangle = \sum_{J_z} R_{J_z J_x}^J(\theta, \varphi) |J, J_z\rangle,$$

где θ, φ - полярный и азимутальный углы вектора \mathbf{h} в системе координат (X,Y,Z), а матрица R выражается через стандартную матрицу поворота: $R_{J_z J_x}^J(\theta, \varphi) = D_{J_z J_h}^J(0, -\theta, -\varphi)$ [32]. Для магнитного поля, направленного вдоль оси X, углы $\theta = \pi/2$, $\varphi = 0$.

После преобразования получаем, что компонента с $J_x = \pm 1/2$ вносит определяющий вклад в волновую функцию основного дырочного состояния ($\approx 70\%$ [51]).

Для состояния с определяющим вкладом компоненты с $J_x = \pm 1/2$ вероятность зеemanовских переходов будет выше приблизительно на два порядка (вклад компоненты с $J_x = \pm 1/2$ возрастает на порядок, соответственно вероятности переходов на два порядка). Интересно продемонстрировать данный эффект с точки зрения анизотропии g-фактора.

Тензор g-фактора содержит прямую информацию о вероятностях зеemanовских переходов. Вероятность w перехода в единицу времени пропорциональна квадрату матричного элемента возмущения [85]:

$$w \sim |V_{fi}|^2 = |\langle f | \hat{\mu} | i \rangle \cdot \mathbf{b}|^2. \quad (2.6.1)$$

Здесь $\hat{\mu}$ — оператор магнитного момента; $|i\rangle, |f\rangle$ — начальное и конечное состояния (соответствующие нижнему и верхнему уровням дублета, образовавшегося в магнитном поле из двукратно вырожденного уровня); вектор \mathbf{b} означает амплитуду магнитного поля электромагнитной волны. Квадрат вектора \mathbf{b} определяет интенсивность волны, а его направление — поляризацию волны.

Сначала рассмотрим случай, когда постоянное магнитное поле \mathbf{H} направлено вдоль оси z — одной из трёх главных осей тензора g -фактора. Компонента вектора \mathbf{b} , параллельная постоянному полю \mathbf{H} , не может вызвать перехода, так как соответствующий матричный элемент обращается в нуль. Поэтому максимальная вероятность зеемановских переходов (при фиксированной мощности электромагнитного излучения) достигается, когда вектор \mathbf{b} лежит в плоскости xu .

Если тензор g -фактора приведён к главным осям x, y, z , то всегда можно выбрать такие два состояния $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ (относящиеся к рассматриваемому двукратно вырожденному уровню), что оператор $\hat{\mu}$ будет иметь вид

$$\hat{\mu}_x = -\frac{1}{2}\mu_B g_x \hat{\sigma}_x, \quad \hat{\mu}_y = -\frac{1}{2}\mu_B g_y \hat{\sigma}_y, \quad \hat{\mu}_z = -\frac{1}{2}\mu_B g_z \hat{\sigma}_z \quad (2.6.2)$$

в базисе $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. При $\mathbf{H} \parallel z$ состояния $|i\rangle, |f\rangle$ будут собственными состояниями оператора $\hat{\sigma}_z$, т. е. как раз базисными векторами $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$. Тогда входящие в (2.6.1) матричные элементы равны

$$\langle f | \hat{\mu}_x | i \rangle = -\frac{1}{2}\mu_B g_x \langle \uparrow | \hat{\sigma}_x | \downarrow \rangle = -\frac{1}{2}\mu_B g_x,$$

$$\langle f | \hat{\mu}_y | i \rangle = -\frac{1}{2}\mu_B g_y \langle \uparrow | \hat{\sigma}_y | \downarrow \rangle = i\frac{1}{2}\mu_B g_y.$$

Это значит, что $w \sim b^2 g_x^2$ при $\mathbf{b} \parallel x$ и $w \sim b^2 g_y^2$ при $\mathbf{b} \parallel y$. При других направлениях вектора \mathbf{b} в плоскости xu вероятность w будет принимать промежуточные значения.

Аналогично, $w \sim b^2 g_x^2$ при $\mathbf{H} \parallel y$ и $\mathbf{b} \parallel x$;

$w \sim b^2 g_y^2$ при $\mathbf{H} \parallel x$ и $\mathbf{b} \parallel y$;

$w \sim b^2 g_z^2$ при \mathbf{H} , лежащем в плоскости xu , и $\mathbf{b} \parallel z$.

Пусть $|g_x| < |g_y| < |g_z|$. Тогда из приведённого выше рассмотрения следует, что для достижения максимальной вероятности переходов нужно ориентировать вектор поляризации электромагнитной волны \mathbf{b} вдоль оси y , если $\mathbf{H} \parallel z$; и вдоль оси z , если \mathbf{H} лежит в

плоскости xu . При этом максимальная вероятность переходов в случае $\mathbf{H} \parallel z$ будет в $(g_z/g_y)^2$ раз меньше аналогичной вероятности для случая $\mathbf{H} \perp z$. Согласно результатам настоящей главы, в Ge/Si квантовых точках $g_z/g_y \sim 10$; поэтому зеемановские переходы при $\mathbf{V} \parallel z$ оказываются подавленными на 2 порядка по сравнению со случаем $\mathbf{H} \perp z$.

Предположим теперь что чувствительность метода ЭПР оказалась достаточной, чтобы зафиксировать сигнал от квантовых точек при $\mathbf{H} \perp z$, но недостаточной при $\mathbf{H} \parallel z$. В этом случае можно непосредственно измерить величины g_x и g_y , но не g_z . Можно ли в данной экспериментальной ситуации получить информацию о g_z ? Оказывается, можно, если проводить измерения в *наклонных* магнитных полях. Покажем это.

Так как здесь нас интересует только качественная сторона вопроса, то положим для простоты, что $g_x = g_y = \frac{1}{10} g_z$. Пусть постоянное магнитное поле \mathbf{H} направлено в плоскости xz , под углом θ к оси x . Тогда g -фактор, согласно (2.3.9), равен

$$g_\theta = \sqrt{g_x^2 \cos^2 \theta + g_z^2 \sin^2 \theta}. \quad (2.6.3)$$

Угол θ следует выбирать таким, чтобы, с одной стороны, вероятность переходов была того же порядка, что и для $\mathbf{H} \parallel x$; и, с другой стороны, чтобы разница между g_θ и g_x была заметной и позволяла определить величину g_z по формуле (2.6.3). Для выяснения того, совместимы ли эти два условия друг с другом, вычислим матричный элемент в выражении (2.6.1).

Достаточно сделать это для двух направлений вектора \mathbf{b} :

- (а) вектор \mathbf{b} параллелен оси y ;
- (б) вектор \mathbf{b} лежит в плоскости xu и перпендикулярен направлению \mathbf{H} , так что угол между \mathbf{b} и осью z равен θ .

Все остальные возможные направления \mathbf{b} , перпендикулярные к постоянному полю \mathbf{H} , дадут промежуточные между (а) и (б) значения вероятности w . Для упрощения вычислений введём вспомогательные векторы $\tilde{\mathbf{b}}$ и $\tilde{\mathbf{H}}$:

$$\tilde{\mathbf{b}} = (g_x b_x, g_y b_y, g_z b_z),$$

$$\tilde{\mathbf{H}} = (g_x H_x, g_y H_y, g_z H_z).$$

Тогда, с учётом (2.6.2), оператор взаимодействия с постоянным магнитным полем \mathbf{H} примет вид

$$\hat{H}_{\text{магн}} = \frac{1}{2} \mu_B \hat{\sigma} \tilde{\mathbf{H}},$$

а выражение (2.6.1) перейдёт в следующее:

$$w \sim \left| \frac{1}{2} \mu_B \langle f | \hat{\sigma} | i \rangle \cdot \tilde{\mathbf{b}} \right|^2. \quad (2.6.1 \text{ а})$$

Далее, вектор $\tilde{\mathbf{b}}$ можно разложить на компоненты $\tilde{\mathbf{b}}_{\parallel}$ и $\tilde{\mathbf{b}}_{\perp}$, параллельную и перпендикулярную к $\tilde{\mathbf{H}}$:

$$\tilde{\mathbf{b}} = \tilde{\mathbf{b}}_{\parallel} + \tilde{\mathbf{b}}_{\perp},$$

$$\tilde{\mathbf{b}}_{\parallel} = (\tilde{\mathbf{b}} \tilde{\mathbf{H}}) \cdot \tilde{\mathbf{H}} / \tilde{H}^2,$$

$$\tilde{\mathbf{b}}_{\perp} = \tilde{\mathbf{b}} - (\tilde{\mathbf{b}} \tilde{\mathbf{H}}) \cdot \tilde{\mathbf{H}} / \tilde{H}^2.$$

Компонента $\tilde{\mathbf{b}}_{\parallel}$ не может влиять на частоту переходов между уровнями, поэтому в (2.6.1 а)

можно заменить $\tilde{\mathbf{b}}$ на $\tilde{\mathbf{b}}_{\perp}$:

$$w \sim \left| \frac{1}{2} \mu_B \langle f | \hat{\sigma} | i \rangle \cdot \tilde{\mathbf{b}}_{\perp} \right|^2.$$

Так как в обозначениях $\tilde{\mathbf{H}}$, $\tilde{\mathbf{b}}_{\perp}$ модель изотропна, то w не зависит от направлений векторов $\tilde{\mathbf{H}}$, $\tilde{\mathbf{b}}_{\perp}$, а только от угла между ними и от величины \tilde{b}_{\perp} . (Зависимость от модуля вектора $\tilde{\mathbf{H}}$ отсутствует, так как состояния $|i\rangle, |f\rangle$ определяются *направлением* постоянного

магнитного поля, а не его величиной.) Но угол между $\tilde{\mathbf{H}}$ и $\tilde{\mathbf{b}}_{\perp}$ всегда равен 90° , так что в результате остаётся только квадратичная зависимость w от \tilde{b}_{\perp} :

$$w \sim \tilde{b}_{\perp}^2.$$

Теперь для получения угловой зависимости w осталось вычислить \tilde{b}_{\perp}^2 . В случае (а) $\tilde{\mathbf{b}}_{\parallel} = 0$, и мы получаем

$$\tilde{b}_{\perp}^2 = \tilde{b}^2 = g_y^2 b^2.$$

В случае (б)

$$\tilde{\mathbf{H}} = H \cdot (g_x \cos \theta, 0, g_z \sin \theta),$$

$$\tilde{\mathbf{b}} = b \cdot (-g_x \sin \theta, 0, g_z \cos \theta).$$

Далее,

$$\tilde{\mathbf{b}}_{\perp} = \frac{b g_x g_z}{g_x^2 \cos^2 \theta + g_z^2 \sin^2 \theta} \cdot (-g_z \sin \theta, 0, g_x \cos \theta),$$

$$b_{\perp}^2 = \frac{b^2 g_x^2 g_z^2}{g_x^2 \cos^2 \theta + g_z^2 \sin^2 \theta},$$

или, с учётом (2.6.3),

$$b_{\perp}^2 = \left(\frac{b g_x g_z}{g_{\theta}} \right)^2.$$

Так как $g_x < g_{\theta} < g_z$, то величина \tilde{b}_{\perp}^2 в случае (б) больше, чем в случае (а). Поэтому максимальная вероятность переходов достигается в случае (б), т. е. при векторе поляризации \mathbf{b} , лежащем в плоскости xz . Зависимость максимальной вероятности w от g_x , g_z и θ (при фиксированной интенсивности электромагнитной волны) имеет вид

$$w \sim \frac{b^2 g_x^2 g_z^2}{g_x^2 \cos^2 \theta + g_z^2 \sin^2 \theta} = \frac{b^2 g_x^2 g_z^2}{g_{\theta}^2}.$$

Отсюда видно, что произведение $w \cdot g_\theta^2$ не зависит от угла θ . Наибольшее значение w достигается при $\theta = 0$, при этом $g_\theta = g_x$.

Из этого рассмотрения ясно, что угол θ , удовлетворяющий поставленным требованиям, существует. Выберем, например, θ таким, чтобы g_θ было равно $g_x \sqrt{2}$; если $g_x : g_z = 1 : 10$, то этот угол равен 5.8° . При этом вероятность переходов (а значит, и чувствительность) будет всего в 2 раза меньшей, чем для $\theta = 0$.

Таким образом, значение g_z может быть получено следующим способом. Сначала измеряется g_x — g -фактор при магнитном поле, направленном вдоль оси x . Затем магнитное поле отклоняется на угол $\theta [\approx 5 \div 6^\circ]$ в направлении оси z и измеряется g -фактор g_θ . После этого g_z вычисляется согласно (2.6.3):

$$g_z = \frac{\sqrt{g_\theta^2 - g_x^2 \cos^2 \theta}}{\sin \theta}.$$

Так как разница $(g_\theta - g_x)$ того же порядка, что и g_x , то относительная погрешность определения g_z будет иметь тот же порядок величины, что и относительные погрешности измерения g_θ и g_x .

Таким образом, наши оценки показывают что не существует жёстких ограничений по правилам отбора на измерение g -фактора дырочного состояния в Ge/Si КТ несмотря на то, что в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel Z$ волновая функция дырочного состояния близка по характеру к тяжёлой дырке.

Разброс по размерам Ge/Si КТ и уширение ЭПР-линии для дырочных состояний

Однако есть существенный фактор, играющий роль в экспериментах по ЭПР, это разброс g -факторов исследуемых центров, приводящий к невозможности регистрации спектров ЭПР.

Чувствительность стандартного ЭПР-спектрометра составляет 10^{11} спин/Гс. Это означает, что если в образце количество исследуемых центров $\sim 3 \cdot 10^{11}$ (исходя из плотности КТ в массивах,

выращенных в наиболее оптимальных условиях МЛЭ), то ширина линии ЭПР не должна превышать $\Delta H=3$ Гс. Это накладывает ограничения на допустимый разброс по g -фактору $\Delta g < 0.002$. Теперь вспомним, что Ge/Si квантовые точки, полученные в результате самоорганизации при гетероэпитаксии, обладают дисперсией по размерам $\sim 10-20\%$. Если воспользоваться данными наших расчётов по зависимости g -фактора от латерального размера квантовой точки (рис.2.5.1), то легко оценить, что разброс в размере основания ± 2 нм сводится к отклонению g -фактора на величину не менее $\Delta g \approx 0.1$, что приводит к ширине ЭПР линии в десятки гаусс.

Следует отметить, что очень долгое время не удавалось наблюдать ЭПР дырочных состояний в недеформированных кристаллах. Существовали лишь эксперименты по ЭПР на вырожденных примесных центрах в одноосно-деформированном кремнии [86]. Дело в том, что случайные локальные деформации, связанные с несовершенствами в кристалле или с дислокациями, приводят к расщеплению, снятию вырождения в валентной зоне. Величина этих деформаций варьируется от одного вырожденного центра к другому, приводя к уширению ЭПР-линии. Поскольку в кристаллах, выращенных на заре становления полупроводниковой технологии (1960 гг.), концентрация дефектов была достаточно велика, это уширение было сравнимо с величиной зеемановского расщепления и приводило к невозможности наблюдения ЭПР. Однако, приложение внешних одноосных деформаций намного превышающих величину внутренних локальных деформаций делает возможной регистрацию ЭПР-сигнала, что и было продемонстрировано в работе [86]. Только в 1978 году с развитием технологии выращивания кремния и возможностью создания совершенных бездислокационных кристаллов (метод бестигельной зонной плавки) была продемонстрирована возможность проведения ЭПР-исследований дырочных состояний в кремнии, легированном бором, без приложения внешних деформаций [87]. В случае локализованных дырочных состояний в массиве Ge квантовых точек также возможны

вариации внутренних деформаций от одной квантовой точки к другой, что также может привести к уширению ЭПР-линии и невозможности наблюдения ЭПР-сигнала.

Альтернативным способом измерения g -фактора может стать исследование резонансного туннелирования в вертикальных двухбарьерных структурах в магнитном поле. В таких экспериментах измеряется туннельный ток носителей, проходящих последовательно сквозь два тонких потенциальных барьера, между которыми расположен слой КТ. При совпадении уровня Ферми в контакте (эмиттере) с уровнем квантования носителя в КТ должно наблюдаться резонансное увеличение туннельного тока. В магнитном поле вместо одного пика в спектре туннельного тока будет наблюдаться два пика, соответствующие двум зеемановским подуровням, по расстоянию между пиками можно определить g -фактор носителей в КТ. Подобная методика была применена к измерению акцепторных состояний, введенных в тонкий псевдоморфный слой Ge, заключенный между двумя Si барьерами [88]. В качестве контактов были использованы слои твердого раствора $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$, сопряженные с легированными (до $\sim 8 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3}$) Si слоями. Поскольку ожидаемая величина зеемановского расщепления составляет десятые доли эВ в полях $\sim 1 \text{Тл}$, то измерения проводились при температурах $T \approx 50 \text{ К}$ и в магнитных полях до 18 Тл. Полученные значения g -фактора имели хорошее совпадение с результатами оптических измерений g -фактора для бора в германии [89, 90], что говорит о том, что данный метод является приемлемым для измерения g -фактора локализованных дырочных состояний.

Выводы к главе 2

Получено выражение для оператора магнитного момента электрона (дырки) в представлении, базисом которого является набор атомных орбиталей. На основе этого выражения развит метод вычисления g -фактора в приближении сильной связи. В рамках метода процедура вычисления g -фактора состоит из следующих этапов: 1) нахождение волновых функций в приближении сильной связи; 2) вычисление матричных элементов магнитного момента; 3) расчёт g -фактора в 1-м порядке теории возмущений с использованием данных матричных элементов.

Вычислены главные значения g -фактора дырки в основном состоянии в пирамидальной Ge/Si квантовой точке. При размере Ge пирамиды 15 нм (длина стороны основания) главные значения равны $g_{xx}=0.69$, $g_{yy}=1.59$, $g_{zz}=12.28$. Оси x , y , z соответствуют направлениям $[110]$, $[\bar{1}10]$ и $[001]$. Сильная анизотропия g -фактора объясняется тем, что основное состояние близко по своей структуре к состоянию с угловым моментом $J=3/2$ и его проекцией $J_z=\pm 3/2$.

При увеличении латерального размера Ge пирамиды $|g_{xx}|$ и $|g_{yy}|$ уменьшаются, а $|g_{zz}|$ возрастает. Данная зависимость объясняется увеличением вклада состояний с угловым моментом $J=3/2$ и его проекцией $J_z=\pm 3/2$.

Установлено, что интенсивность зеемановских переходов при направлении постоянного магнитного поля вдоль оси симметрии Ge пирамиды подавлена на 2 порядка по сравнению со случаем, когда поле направлено в плоскости основания пирамиды. Показано, что оптимальным режимом для определения величины g_z методом ЭПР является использование наклонного магнитного поля, составляющего угол $\sim 5^\circ$ с плоскостью основания нанокластера Ge.

ГЛАВА 3. СПИНОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ДЫРОК В МАССИВАХ

Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧЕК.

3.1. Постановка задачи

Проблема передачи спиновой информации в полупроводниковых структурах без потери является актуальной для создания приборов и логических схем, использующих спиновую степень свободы. В данной главе проведено теоретическое исследование спиновой релаксации при транспорте спин-поляризованных носителей заряда в массиве Ge/Si квантовых точек.

Переворот спина может произойти на двух этапах спинового транспорта: либо когда носитель локализован внутри квантовой точки, либо при туннелировании между двумя туннельно-связанными квантовыми точками. Поэтому стоит задача вычисления времени спиновой релаксации 1) для носителя локализованного внутри Ge квантовой точки, помещенной в магнитное поле, 2) при туннелировании дырки между двумя туннельно-связанными Ge квантовыми точками. Для решения первой задачи необходимо рассчитать структуру волновых функций для зеэмановских подуровней в магнитном поле. Затем вычислить матричный элемент оператора возмущения, вызывающего переворот спина. Для решения второй задачи необходимо вычислить вероятность туннелирования между соседними квантовыми точками с переворотом спина и без переворота спина.

3.2. СПИНОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ МЕЖДУ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

3.2.1. Метод вычисления

В данном параграфе рассматривается спиновая релаксация при резонансном туннелировании дырки между двумя туннельно-связанными Ge квантовыми точками. Для вычисления времени спиновой релаксации необходимо рассчитать вероятность переворота спина при туннелировании. Вероятность туннелирования зависит от величины интеграла перекрытия между волновыми функциями в соседних квантовых точках (точнее от его квадрата) [91]:

$$W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |I_{ij}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_j), \quad (3.2.1)$$

здесь I_{ij} – интеграл перекрытия, $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ – энергии дырок в i и j квантовой точке.

Чтобы найти интеграл перекрытия мы рассмотрели бесконечный одномерный кристалл, построенный из одинаковых Ge квантовых точек. Ширина зоны такого кристалла определяется интегралом перекрытия. Поэтому если решить задачу об энергетическом спектре такого кристалла, то автоматически будет решена задача о нахождении интеграла перекрытия. Задача о спектре может быть решена путём нахождения собственных значений для модельной структуры, представляющей собой Si параллелепипед со встроенной внутрь Ge квантовой точкой (см. Рис.3.2.1). Мы прикладываем к такой структуре периодические граничные условия:

$$\psi(-d/2, y, z) = \psi(d/2, y, z) \quad (3.2.2)$$

и

$$\psi(-d/2, y, z) = -\psi(d/2, y, z), \quad (3.2.3)$$

здесь d – размер Si параллелепипеда в x направлении, $\psi(x, y, z)$ – волновая функция дырки.

Интеграл перекрытия определяется как $I_{+-}(d) = |E_+ - E_-|/4$, здесь E_+ и E_- энергии состояний, соответствующих граничным условиям (3.2.2) и (3.2.3).

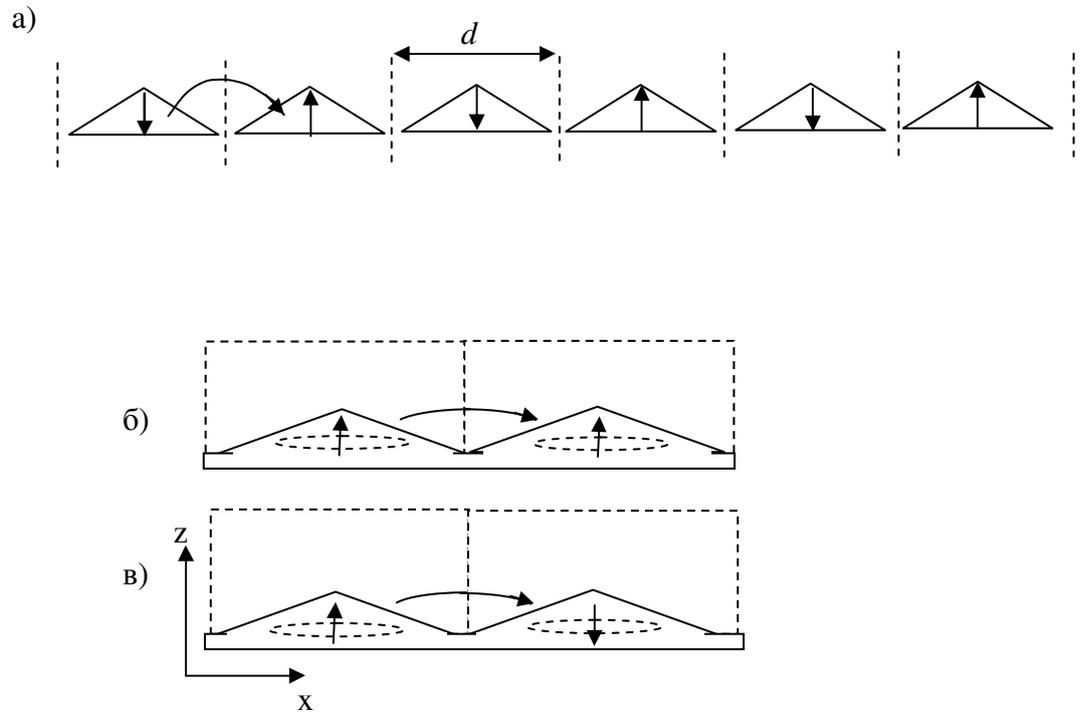


Рис.3.2.1. а) схематическое представление одномерного кристалла, атомами которого служат Ge квантовые точки. (б), (в) - схематическое представление двух типов туннельных процессов: б) туннелирование без переворота спина, в) туннелирование с переворотом спина.

Для туннелирования с переворотом спина описанный выше традиционный подход не годится. При переходе в соседнюю ячейку нашего кристалла спин должен перевернуться. Здесь используется граничное условие

$$|\psi\rangle_{x=0} = K|\psi\rangle_{x=d}, \quad (3.2.4)$$

то есть принимается, что при переходе в соседнюю ячейку волновая функция трансформируется в крамерсовски-сопряженную волновую функцию.

Такое граничное условие не совсем понятно с точки зрения зоны Бриллюэна нашего одномерного кристалла (см. рис.3.2.2). Например, граничное условие (3.1.1) соответствует центру зоны Бриллюэна $k=0$, а граничное условие (3.1.2) соответствует точке $k_{max} = \pi/d$.

Если рассмотреть граничное условие $|\psi\rangle_{x=0} = i|\psi\rangle_{x=d}$, то оно соответствует квазиимпульсу $k = 1/2 k_{max}$ или $k = \pi/2d$. В случае кристаллов без центра инверсии эта точка соответствует максимальному спиновому расщеплению при $k \neq 0$.

Покажем, что задача нахождения собственных значений с граничным условием $|\psi\rangle_{x=0} = K|\psi\rangle_{x=d}$, может свестись к задаче с граничным условием

$$|\psi\rangle_{x=0} = i|\psi\rangle_{x=d} \quad (3.2.5)$$

Операция Крамерсовского сопряжения это комплексное сопряжение + переворот спина.

На волновую функцию типа $u_{\uparrow}(x)\exp(ikx)$ действует так: $u_{\downarrow}^*(x)\exp(-ikx)$.

Будем искать такое состояние, которое удовлетворяло следующему условию: при переносе вдоль нашего массива на расстояние d его волновая функция переходит в крамерсовски-сопряженную. ($|\psi\rangle_{x=0} = K|\psi\rangle_{x=d}$)

Пусть $|\psi\rangle$ - волновая функция с квазиимпульсом $k = \pi/2d$ и с энергией E (*блховская волна*).

Такой квазиимпульс, как мы уже говорили, соответствует $k = 1/2 k_{max}$, ($kd = \pi/2$), $\exp(ikd) = i$. То есть функция $|\psi\rangle$ удовлетворяет граничному условию $|\psi\rangle_{x=0} = i|\psi\rangle_{x=d}$.

Тогда $K|\psi\rangle$ - это волновая функция с квазиимпульсом $k = -\pi/2d$ и с той же самой энергией E .

Построим функцию $|\varphi\rangle$ следующим образом:

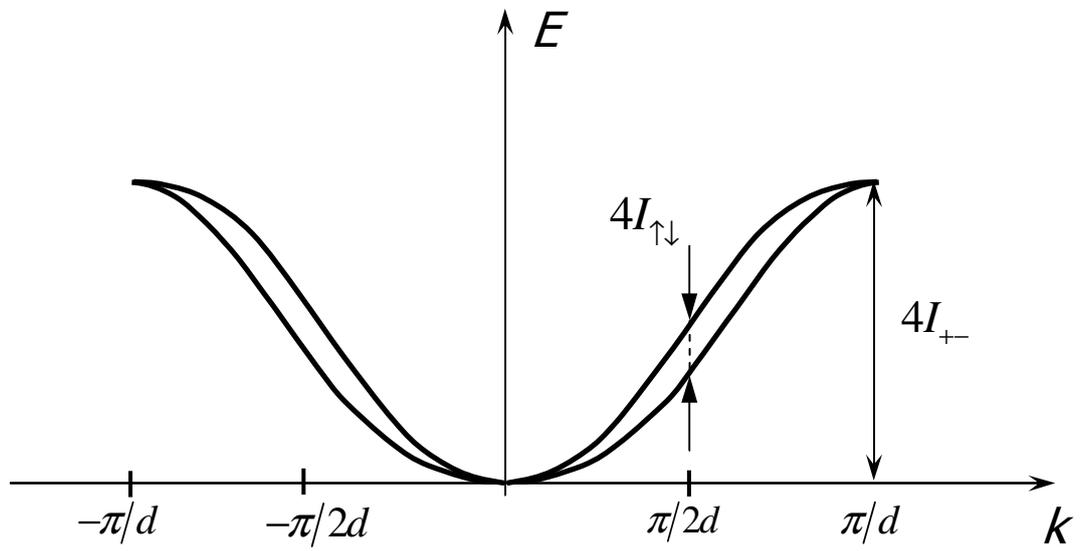


Рис.3.2.2. Схематическое изображение энергетической зоны одномерного кристалла, построенного из одинаковых Ge квантовых точек

$$|\varphi\rangle = (|\psi\rangle + iK|\psi\rangle)/\sqrt{2}.$$

Перенесем $|\varphi\rangle$ на расстояние d . Тогда $|\psi\rangle \rightarrow i|\psi\rangle$,

$$K|\psi\rangle \rightarrow -iK|\psi\rangle,$$

$$|\varphi\rangle \rightarrow (i|\psi\rangle + K|\psi\rangle)/\sqrt{2}.$$

Рассмотрим крамеровское сопряжение $K|\varphi\rangle = (K|\psi\rangle + (-i)(-|\psi\rangle))/\sqrt{2} = (i|\psi\rangle + K|\psi\rangle)/\sqrt{2}$.

Сравнивая оба выражения, можно заключить, что функция $|\varphi\rangle$ при переносе на d переходит в крамеровски сопряжённую функцию, $|\varphi\rangle \rightarrow K|\varphi\rangle$.

Очевидно, что функция $|\varphi\rangle$ имеет ту же энергию E (можно выразить $|\psi\rangle$ через $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle = (|\varphi\rangle - iK|\varphi\rangle)/\sqrt{2}$).

Таким образом, получаем, что волновая функция, удовлетворяющая граничному условию $|\psi\rangle_{x=0} = K|\psi\rangle_{x=d}$, имеет ту же энергию что и блоховская функция с $k = k_{max}/2$. То есть, решение задачи с граничным условием $|\psi\rangle_{x=0} = i|\psi\rangle_{x=d}$, эквивалентно задаче с граничным условием $|\psi\rangle_{x=0} = K|\psi\rangle_{x=d}$.

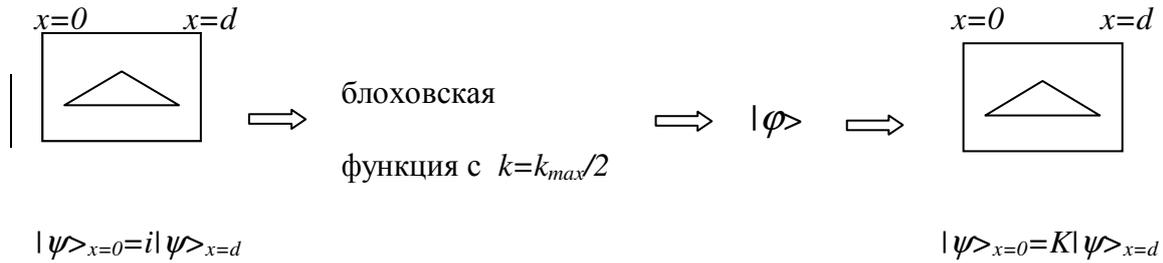
Если посмотреть на структуру искомого состояния $|\varphi\rangle$, то можно увидеть что это суперпозиция двух блоховских волн, с противоположными k и противоположными спинами. Спиновое расщепление в точке $k = k_{max}/2$ связано с отсутствием пространственной симметрии, здесь двукратное крамеровское вырождение снимается, и состояния с противоположными спинами имеют разные значения энергии.

Таким образом, решая задачу с граничным условием (3.2.5) мы можем найти собственные значения E_{1*} и E_{2*} для задачи с граничным условием (3.2.4). Интеграл перекрытия в данном случае будет связан со спиновым расщеплением $I_*(d) = |E_{1*} - E_{2*}|/4$.

Развитый здесь подход позволяет получить величину спинового расщепления при любых значениях квазиимпульса k , и рассчитать закон дисперсии для одномерного кристалла. В общем случае граничное условие запишется:

$$|\psi\rangle_{x=0} = \exp(i\varphi)|\psi\rangle_{x=d}, \text{ где } \varphi = kd.$$

Приведем логическую цепочку наших рассуждений:



3.2.2. Вероятность переворота спина при резонансном туннелировании

В расчёты заложена стандартная геометрическая модель Ge квантовой точки, принятая в данной работе: пирамидальная форма Ge нанокластеров и типичные размеры (высота $h = 1.5$ нм, сторона основания $l = 15$ нм). При рассмотрении туннелирования между основными состояниями в соседних квантовых точках интегралы перекрытия составили ~ 0.01 мэВ для процессов без переворота спина и ~ 0.001 мэВ для процессов с переворотом спина. В соответствии с этими значениями вероятность туннелирования с переворотом спина на 2 порядка меньше, чем вероятность туннелирования без переворота спина. Другими словами, для основного состояния туннелирование осуществляется преимущественно с сохранением спина: на сто событий туннелирования приходится лишь один переворот спина. Для возбуждённых состояний вероятность переворота спина возрастает. В среднем на 5-10 событий туннелирования приходится один переворот спина.

Зависимость вероятности туннелирования от номера состояния в квантовой точке является не плавной функцией, вероятность туннелирования осциллирует при переходе от одного состояния к другому, хотя общая тенденция к возрастанию сохраняется. (Рис.3.2.3).

Возрастание объясняется бóльшим радиусом локализации возбужденных состояний, что приводит к бóльшим значениям интегралов перекрытия. Осцилляции являются следствием

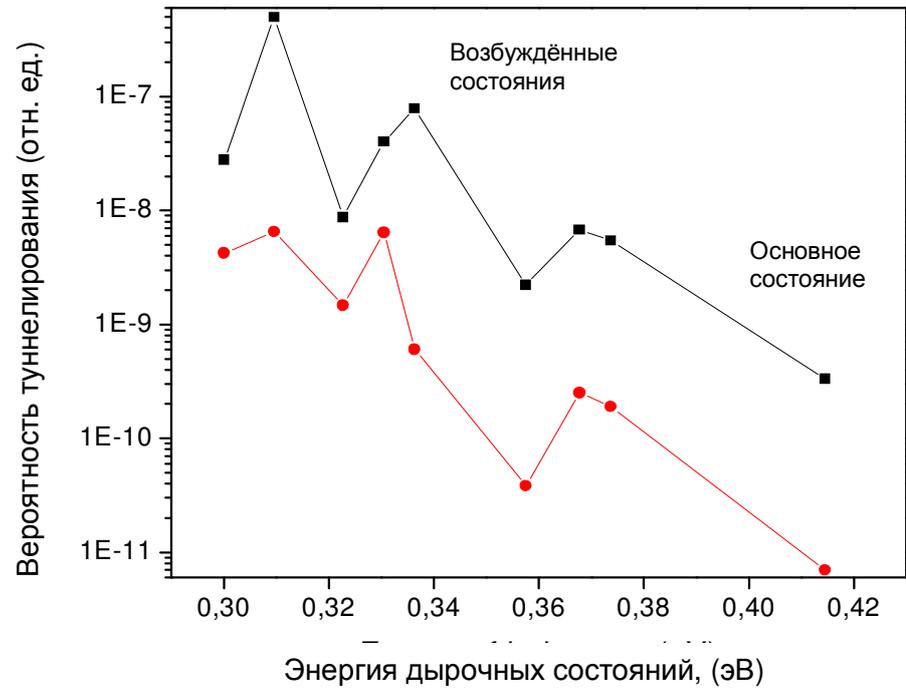


Рис.3.2.3: Вероятности туннелирования с переворотом спина и без переворота спина для основного и возбуждённых состояний в Ge квантовой точке (высота Ge нанокластера $h=1.5$ нм, латеральный размер $l=15$)

зависимости интегралов перекрытия от симметрии волновых функции. Например, интеграл перекрытия для p -состояний больше, чем для s - и d - состояний. Это легко понять, рассмотрев волновые функции первых 4-х состояний в квантовой точке (рис. 3.2.4). Волновая функция основного состояния имеет s -образный вид и концентрируется в центре квантовой точки в области ~ 3 -5 нм. Волновые функции первого и второго возбужденных состояний имеют p -образный вид и подходят ближе к краям квантовой точки. Поэтому интегралы перекрытия для них больше. А вот волновая функция третьего состояния имеет d -образный вид, концентрируясь также в центре квантовой точки, но имеет малые лепестки в отличие от s -образной функции. Поэтому интегралы перекрытия для этого состояния больше, чем для основного состояния, но меньше, чем для первого и второго возбужденных состояний.

Исследованы зависимости вероятности переворота спина от размера и от формы квантовой точки (рис.3.2.5). Получено, что вероятность переворота спина зависит от отношения высоты к размеру основания Ge нанокластера, h/l . При фиксированной высоте h и увеличении латерального размера l обе вероятности туннелирования убывают, но вероятность туннелирования с переворотом спина всегда остаётся меньше. Более информативной физической величиной, характеризующей процесс переворота спина при туннелировании является отношение вероятностей туннелирования без переворота спина (P_1) и с переворотом спина (P_2). При малых размерах квантовой точки $l < 10$ нм эта величина резко увеличивается, что свидетельствует об уменьшении относительной вероятности переворота спина (рис.3.2.6).

При фиксированном латеральном размере l и увеличении высоты квантовой точки h вероятность переворота спина возрастает. Например, при увеличении h до 4.5 нм вероятность туннелирования без переворота спина всего в два раза превышает вероятность туннелирования с переворотом спина, тогда как в случае $h=1.5$ нм эти вероятности различаются на два порядка (данные приведены для $d=l=15$ нм). То есть вероятность переворота спина возрастает с увеличением отношения h/l .

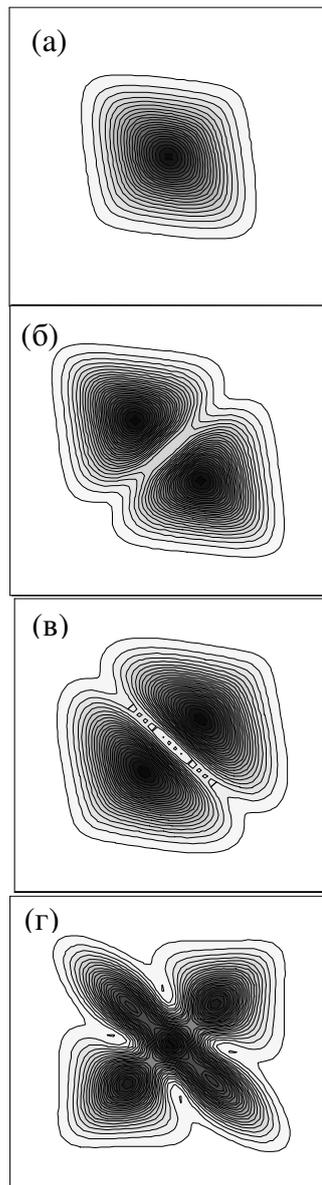


Рис. 3.2.4. Волновые функции для первых четырёх состояний: (а) – основное состояние, (б) – первое возбуждённое, (в) – второе возбуждённое, (г) – третье возбуждённое состояние.

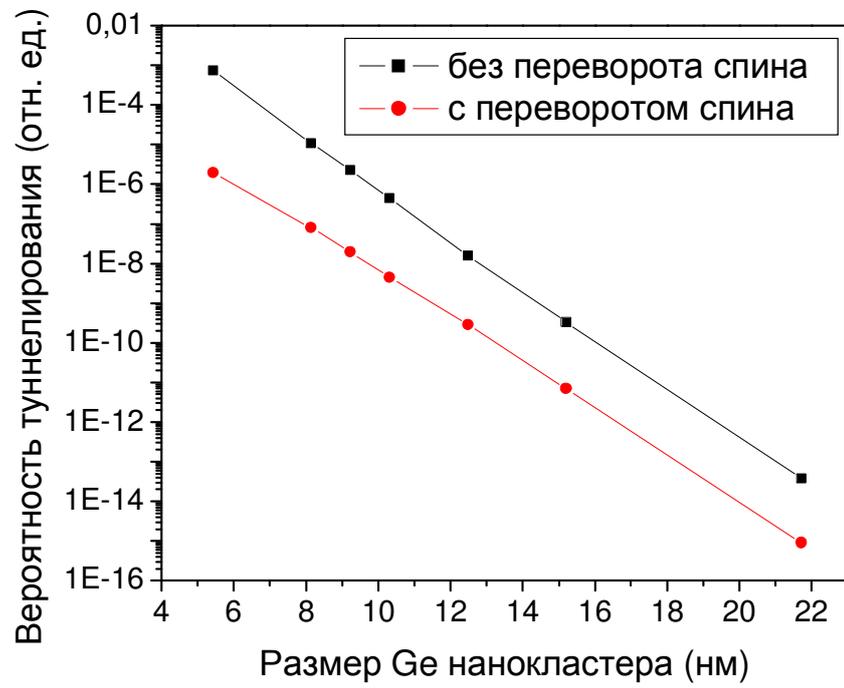


Рис.3.2.5: Зависимость вероятностей туннелирования с переворотом спина и без него от латерального размера КТ (высота Ge нанокластера $h=1.5$ нм).

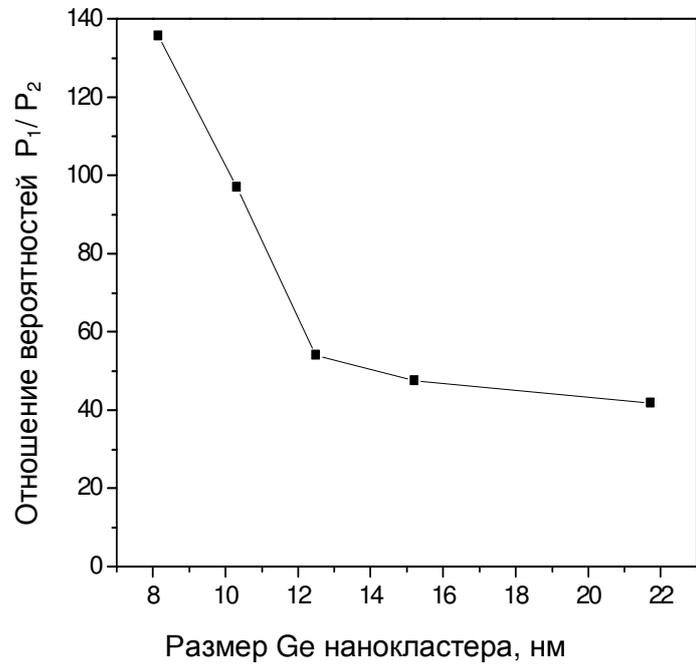


Рис.3.2.6. Отношение вероятностей туннелирования без переворота спина (P_1) и с переворотом спина (P_2),

P_1/P_2 в зависимости от латерального размера квантовой точки (высота $h=1.5$ нм)

Как было уже отмечено выше, вероятность туннелирования с переворотом спина связана со спиновым расщеплением зоны при $k \neq 0$. Для рассматриваемого одномерного кристалла спиновое расщепление составляет $\Delta E_{\uparrow\downarrow} \sim 10^{-6}$ эВ при $k = \pi/2d$, где d – расстояние между квантовыми точками в кристалле. Данное спиновое расщепление эквивалентно существованию некоторого эффективного магнитного поля, зависящего от направления и величины квазиимпульса k . Согласно нашим расчётам величина спинового расщепления при малых k имеет линейную зависимость от k , $\Delta E_{\uparrow\downarrow} = \alpha \cdot k$, где коэффициент пропорциональности $\alpha = 2 \cdot 10^{-12}$ эВ·см. Для сравнения можно привести значение константы Бычкова–Рашбы, определяющей спиновое расщепление для электронов в двумерном электронном газе в асимметричной $\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x/\text{Si}/\text{Si}_{(1-x)}\text{Ge}_x$ квантовой яме $\alpha_{BR} = 0.55 \cdot 10^{-12}$ эВ·см [59]. В системе с двумерным газом появление спинового расщепления связано с отсутствием зеркальной симметрии относительно плоскости двумерного газа.

В нашем искусственном одномерном кристалле, построенном из одинаковых Ge квантовых точек, так же отсутствует зеркальная симметрия относительно плоскости роста (100) Ge квантовой точки. Таким образом, по аналогии с двумерными системами можно заключить, что главной причиной переворота спина является структурная асимметрия Ge нанокластера. Спин-орбитальное взаимодействие в данной системе эквивалентно существованию некоторого эффективного магнитного поля, разориентирующего спин.

Действие такого эффективного поля на спин показано на рисунке 3.2.7. Здесь показаны результаты расчётов распределения по квантовой точке вектора с компонентами $(\langle J_x \rangle, \langle J_z \rangle)$, который можно рассматривать как среднее направление спина в рассматриваемой точке \mathbf{r} , так как $\langle J_x \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | J_x | \psi(\mathbf{r}) \rangle$, $\langle J_z \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | J_z | \psi(\mathbf{r}) \rangle$. Как видно из рисунка, при локализации носителя внутри квантовой точки (без туннелирования в соседнюю точку) происходит разориентация спина, связанная, с неопределенностью квазиимпульса $\Delta k_x, \Delta k_y \sim 1/l$. Дело в том, что геометрия Ge квантовой точки (отсутствие зеркальной симметрии относительно

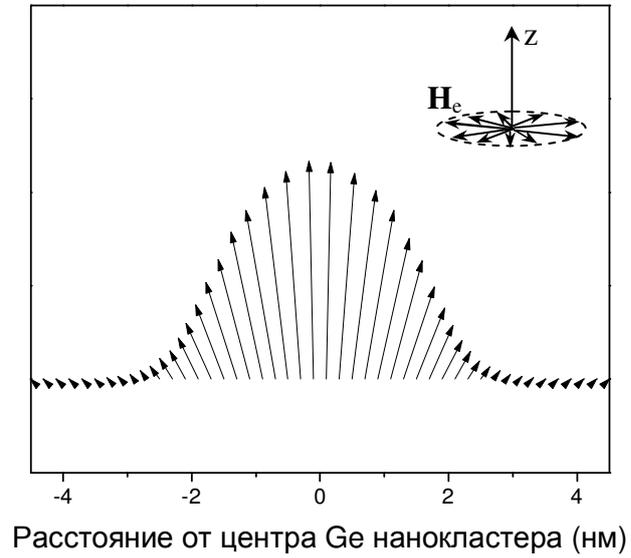


Рис.3.2.7. Распределение вектора $(\langle J_x \rangle, \langle J_z \rangle)$ по Ge нанокластеру для основного состояния ($h=1.5$ нм, $l=15$ нм). Для наглядности угол отклонения эффективного спина увеличен в 5 раз.

плоскости роста) приводит к возникновению выделенного направления \mathbf{v} вдоль оси роста Z (направление $[001]$). Вектор \mathbf{v} является полярным, и в некоторых случаях (например, для 2D структур с асимметричным легированием [59]) его направление отражает направление электрического поля, перпендикулярного плоскости 2D газа. Имея полярный вектор \mathbf{v} , для свободного носителя заряда в двумерной плоскости можно ввести эффективное магнитное поле, направление которого определяется направлением импульса электрона \mathbf{k}_\square и направлением вектора \mathbf{v} , $\mathbf{H}_{eff} \sim \alpha (\mathbf{k}_\square \times \mathbf{v})$. В случае локализованного носителя в квантовой точке отсутствует определенное направление импульса, существует лишь неопределенность по импульсу $\Delta\mathbf{k}_\square$. Это приводит к возникновению неопределенности эффективного магнитного поля, лежащего в плоскости основания квантовой точки. $\Delta\mathbf{H}_{eff} \sim \alpha (\Delta\mathbf{k}_\square \times \mathbf{v})$. Это магнитное поле не имеет определенного направления, распределение его показано на вставке к рисунку 3.2.7. Среднее значение этого поля, как видно из рисунка, равно 0. Таким образом, разориентация спина без туннелирования не приводит к перевороту спина, влияя лишь на среднее значение проекции эффективного спина на ось Z . На рисунке 3.2.7 показано сечение xz квантовой точки, разориентация спина в этой плоскости вызывается компонентой магнитного поля перпендикулярной этой плоскости, то есть направленной вдоль оси y . Ближе к краям квантовой точки угол отклонения спина возрастает и достигает максимального значения, зависящего от отношения высоты КТ к размеру основания (этот эффект можно объяснить тем, что вблизи краев КТ волновая функция дырочного состояния образована состояниями с $J_z = \pm 1/2$ (лёгкой дырки) (см. рис. 3.2.8). Спин тяжелой дырки практически не поворачивается в эффективном магнитном поле, поскольку g -фактор тяжелой дырки в плоскости основания квантовой точки близок к нулю. Спин легкой дырки, наоборот, легко поворачивается, поскольку её g -фактор $g_{lh} = 4k \approx 10$ в аналогичном направлении (k – параметр Латтинжера).



Рис.3.2.8. Профиль распределения плотности вероятности для лёгкой дырки (штриховая линия) и тяжёлой дырки (сплошная линия), входящих в состав полной волновой функции основного состояния. Обе кривые отнормированы на полную вероятность.

При туннелировании из одной квантовой точки в другую появляется выделенное направление туннелирования \mathbf{n} , аналог направления импульса для двумерного электрона. Спин носителя, туннелирующего из одной квантовой точки в другую, будет ощущать магнитное поле $\sim \alpha \cdot \Delta k_n [\mathbf{n} \times \mathbf{v}]$, направленного перпендикулярно направлению туннелирования. Например, если носитель туннелирует вдоль оси x , то поле будет направлено по y . Это поле вызывает прецессию спина в перпендикулярной плоскости, что приводит к повороту спина на угол $\varphi = \omega_{eff} \delta t$, где δt - время туннелирования, ω_{eff} - частота прецессии в эффективном магнитном поле (см. рис.3.2.9 (а)). В результате конечного числа поворотов спина, связанных с туннелированием носителя из точки в точку, состояние со спином вверх $|\uparrow\rangle$ переходит в состояние со спином вниз $|\downarrow\rangle$.

Для более глубокого понимания связи между возникновением эффективного магнитного поля и асимметрией структуры мы рассмотрели ряд модельных объектов, молекул со структурной асимметрией и без неё (Рис. 3.2.10). Была решена задача на собственные значения и найдены волновые функции для этих структур в двухцентровом приближении в модели сильной связи. Рассматривались только p -орбитали, поскольку для s -орбиталей учёт спин-орбитального взаимодействия не существен. Для простоты принималось, что взаимодействие между соседними атомами не зависит от расстояния между ними. Спин-орбитальное взаимодействие включалось в рассмотрение, так же как и ранее. Для определенности рассматривалось состояние со спином вверх $|\uparrow\rangle$. Рассчитывались величины $\langle \psi | J_x | \psi \rangle$, $\langle \psi | J_y | \psi \rangle$, $\langle \psi | J_z | \psi \rangle$, а затем строился вектор с такими компонентами на каждом атоме. Из рис. 3.2.10 видно, что отсутствие зеркальной симметрии относительно плоскости роста ведет к отклонению эффективного спина дырки от направления Z .

Возвращаясь к реальным Ge квантовым точкам, можно сделать вывод, что в квантовых точках, симметричных относительно отражения в плоскости роста (100), эффективное

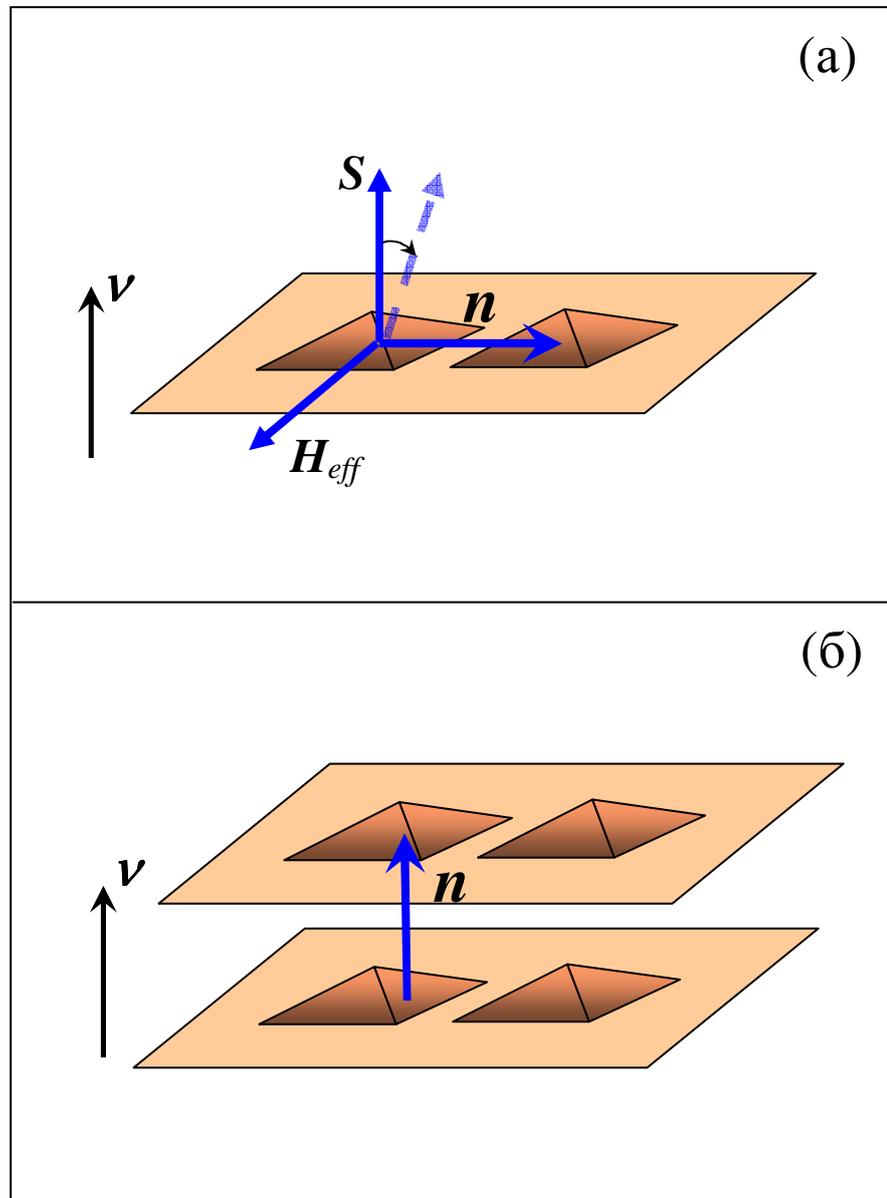


Рис. 3.2.9. Изображение процессов туннелирования между квантовыми точками в плоскости массива квантовых точек и в вертикально сопряженных цепочках КТ. Стрелки показывают направление эффективного спина \mathbf{S} , направление туннелирования \mathbf{n} , направление эффективного магнитного поля \mathbf{H}_{eff} , направление вектора ν , связанного с асимметрией КТ.

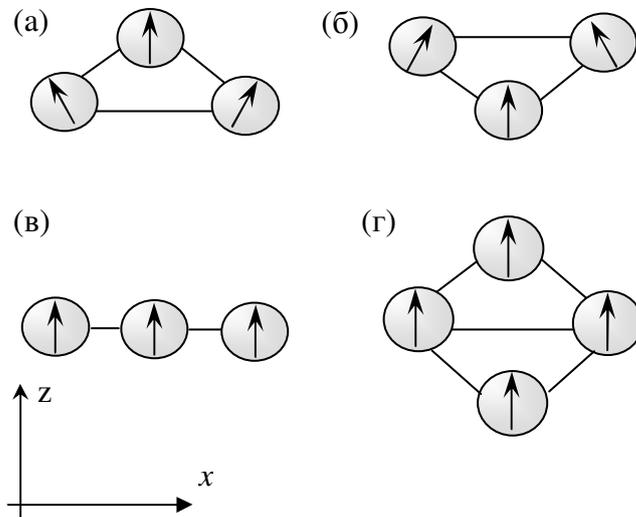


Рис. 3.2.10: Схематическое изображение модельных объектов. Верхние молекулы (а), (б) обладают структурной асимметрией. Нижние молекулы имеют более высокую симметрию (в), (г). Стрелки показывают направление вектора $(\langle J_x \rangle, \langle J_z \rangle)$.

магнитное поле отсутствует. Таким образом, структурная асимметрия обеспечивает возникновение взаимодействия, приводящего к перевороту спина.

Следует отметить, предложенный механизм работает только при туннелировании между точками, находящимися в плоскости двумерного массива квантовых точек.

При туннелировании дырок в многослойной структуре с вертикально-сопряженными квантовыми точками данный механизм не работает, так как в этом случае эффективное магнитное поле $\sim \alpha \cdot \Delta k_n [\mathbf{v} \times \mathbf{n}]$ равно нулю, так как направление туннелирования в данном случае параллельно направлению \mathbf{v} (см. рис. 3.2.9(б)).

Поскольку мы получили, что переворот спина происходит путем последовательных поворотов спина при туннелировании носителя из одной квантовой точки в другую в поперечном магнитном поле, то мы можем найти причину увеличения вероятности переворота спина для возбужденных состояний. Это связано со структурой волновой функции. Волновая функция основного дырочного состояния в Ge КТ строится из состояний тяжелой дырки и имеет малую долю состояний легкой дырки. Для возбужденных состояний вклад состояний легкой дырки увеличивается, и поскольку спин легкой дырки имеет более высокую частоту прецессии в поперечном магнитном поле, это приводит к повышению вероятности переворота спина.

Остался невыясненным еще один вопрос, о причине резкого уменьшения вероятности переворота спина в квантовых точках малого размера ($l < 10$ нм). Как мы установили раньше, переворот спина происходит за счёт присутствия в составе волновой функции состояния легкой дырки с $J_z = 1/2$. Согласно нашим расчетам часть волновой функции, имеющая характер тяжелой дырки ($J_z = 3/2$), сосредоточена в центре квантовой точки, а часть волновой функции, имеющая характер легкой дырки ($J_z = 1/2$), располагается ближе к краям квантовой точки (см. рис. 3.2.8) Легкая дырка как бы вытесняется тяжелой дыркой из центра квантовой

точки. Для размеров $12 \text{ нм} < l < 20 \text{ нм}$ вся волновая функция, даже её хвосты, практически помещается внутри квантовой точки. А вот для размеров $l < 10 \text{ нм}$ внутри квантовой точки помещается только тяжелая компонента волновой функции.

Хвосты волновой функции, имеющие характер лёгкой дырки, оказываются вытесненными в Si окружение квантовой точки. В кремнии эффективное магнитное поле воздействует на спин слабо, поскольку параметр Латтинжера в Si $|k| = 0.42$, тогда как в Ge составляет $|k| = 3.41$ [78]. Поэтому для квантовых точек с $l < 10 \text{ нм}$ эффективное магнитное поле практически не действует на спин, и вероятность переворота спина снижается.

Далее для проведения теоретических оценок времени спиновой релаксации при транспорте в массивах КТ необходимо учесть следующее. Существующий в реальных массивах КТ разброс по размерам (дисперсия $\sim 10\text{-}20\%$) приводит к разбросу по энергиям локализованных состояний. Перенос заряда в массиве квантовых точек происходит в результате прыжков носителей с одной квантовой точки на другую. Разница в положении энергетических уровней между КТ может компенсироваться либо за счёт поглощения (испускания) фононов, либо за счёт флуктуаций потенциала. Таким образом, существует важный дополнительный фактор, приводящий к спиновой релаксации при транспорте: взаимодействие с фононами или с флуктуациями потенциала при туннелировании, который должен быть учтён. На первом шаге рассмотрим более простой случай: переворот спина локализованной дырки в отдельной Ge квантовой точке за счёт взаимодействия с фононами.

3.3. СПИНОВАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ДЫРКИ В Ge/Si КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ ЗА СЧЁТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ФОНОНАМИ

В данной главе представлены результаты вычислений времени спиновой релаксации за счёт взаимодействия с фононами для дырочных состояний в изолированной Ge квантовой точке в магнитном поле. В нулевом магнитном поле матричный элемент взаимодействия с фононами равен нулю. Это легко продемонстрировать, исходя из свойств симметрии относительно обращения времени. В отсутствие магнитного поля выполняется следующее свойство:

$$\langle K\psi | \hat{H} | K\varphi \rangle = (\langle \psi | \hat{H} | \varphi \rangle)^* \quad \forall \varphi, \psi \quad (3.3.1)$$

Обозначим теперь $\langle K\psi | \hat{H} | \psi \rangle = A$ и, пользуясь (3.3.1), запишем:

$$\langle KK\psi | \hat{H} | K\psi \rangle = A^*.$$

Поскольку $\langle KK\psi | = -\langle \psi |$, то $-\langle \psi | \hat{H} | K\psi \rangle = A^*$. Далее заметим, что $-\langle K\psi | \hat{H} | \psi \rangle = A$, и получим $-A = A$, то есть $A = 0$. Таким образом, доказано, что $\langle K\psi | \hat{H} | \psi \rangle = 0$.

В магнитном поле снимается Крамерсовское вырождение энергетических уровней. Инвариантность по отношению к обращению времени уже не выполняется. Следовательно, матричный элемент взаимодействия с фононами отличен от нуля. Природа спиновой релаксации за счёт взаимодействия с фононами состоит в том, что колебания решетки приводят к модуляции спин-орбитального взаимодействия. Спин-орбитальное взаимодействие передаёт спиновой подсистеме возмущение волновой функции в координатном пространстве, что в конечном итоге приводит к спиновой релаксации. Следуя подходу, развитому в работе Roth [92] для расчёта времени спин-решёточной релаксации, мы вычисляем по теории возмущения новые волновые функции в магнитном поле (используя полученное в предыдущей главе значение g-фактора), а затем находим матричный элемент оператора взаимодействия с фононами.

Рассмотрим подробнее структуру волновых функций зеemanовских подуровней в магнитном поле. Для определенности будем рассматривать случай магнитного поля, приложенного вдоль оси симметрии квантовой точки Z (направление [001]). Согласно расчётам методом сильной связи с включением в гамильтониан оператора взаимодействия с магнитным полем ($\hat{H}_{\text{магн}} = -\mu_B \cdot \hat{\mu} \mathbf{H}$) волновые функции представляют собой следующую суперпозицию. Состояние со спином вверх формируется преимущественно (~84%) состоянием с проекцией $J_z=3/2$ и имеет небольшую добавку состояния с $J_z=-1/2$, которая подмешивается за счёт спин-орбитального взаимодействия:

$$|\uparrow\rangle = \alpha|+3/2\rangle + \beta|-1/2\rangle.$$

Состояние со спином вниз в основном строится из состояния с проекцией $J_z=-3/2$ и имеет небольшую добавку состояния с $J_z=1/2$:

$$|\downarrow\rangle = \alpha|-3/2\rangle + \beta|+1/2\rangle$$

Релаксация спина идёт благодаря модуляции колебаниями решетки величины вклада состояния с противоположным спином. С ростом магнитного поля волновые функции меняются следующим образом: для верхнего зеemanовского подуровня увеличивается вклад состояний $|-1/2\rangle$ с противоположным направлением спина, вклад же состояния $|+3/2\rangle$ уменьшается. Для нижнего зеemanовского подуровня ситуация обратная: возрастает вклад состояний $|-3/2\rangle$, вклад же состояния $|+1/2\rangle$ уменьшается..

Произведя разложение вновь полученных волновых функций по старым волновым функциям, полученным без включения магнитного поля, мы выяснили, что изменение волновой функции основного состояния происходит за счёт подмешивания возбуждённых состояний дырки в Ge квантовой точке:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \sum_{\text{exc}} |\psi_{\text{exc}}\rangle \frac{\langle \psi_{\text{exc}} | H_{\text{магн}} | \psi_0 \rangle}{(E_0 - E_{\text{exc}})} = |\psi_0\rangle + \sum_n \alpha_n(H) \cdot |\psi_n\rangle. \quad (3.3.2)$$

Результаты расчётов показывают, что не все возбуждённые состояния вносят эквивалентный вклад в изменение волновой функции основного состояния. Вклад первого, третьего и двенадцатого возбуждённых состояний на порядок превышает остальные, для этих состояний коэффициенты в разложении $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \sum_n \alpha_n \psi_n$, где ψ_n - возбужденные состояния, составляют $\alpha_n \sim 10^{-4}$ в магнитном поле $H=1$ Тл. На основе анализа вида волновых функций получено, что главным фактором, определяющим вклад возбуждённых состояний, является симметрия волновых функций. Основное дырочное состояние в Ge КТ строится преимущественно из состояния $J_z=3/2$, которое имеет s -образную волновую функцию. Согласно результатам разложения волновой функции основного состояния, оно в основном взаимодействует с s -образным состоянием лёгкой дырки третьего возбуждённого уровня и с p -образным состоянием лёгкой дырки первого возбуждённого уровня, поскольку они в основном концентрируются в центре квантовой точки, как и основное состояние (см. Рис. 3.3.1). Полученные результаты по разложению волновых функций необходимы при рассмотрении процессов переворота спина, идущих через промежуточные возбужденные состояния (двухфононные процессы). Теперь с помощью найденных волновых функций можно вычислить матричный элемент оператора взаимодействия с фононами. На первом этапе будем рассматривать процессы при гелиевых температурах ($T \approx 4\text{К}$) поэтому учитываем только акустические фононы. Оператор взаимодействия с акустическими фононами описывается формулой:

$$H_{m'm}^\varepsilon = \sum_{ij} D_{m'm}^{ij} \varepsilon_{ij},$$

где $D_{m'm}^{ij}$ - тензор потенциала деформации, а компоненты тензора деформации выражаются

так: $\varepsilon_{ij} = \sum_q i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_q}} \frac{1}{2} (q_i (e_q)_j + q_j (e_q)_i) (e^{iqr} a_q - e^{-iqr} a_q^\dagger)$, где ρ - плотность матрицы, \mathbf{e}_q - вектор

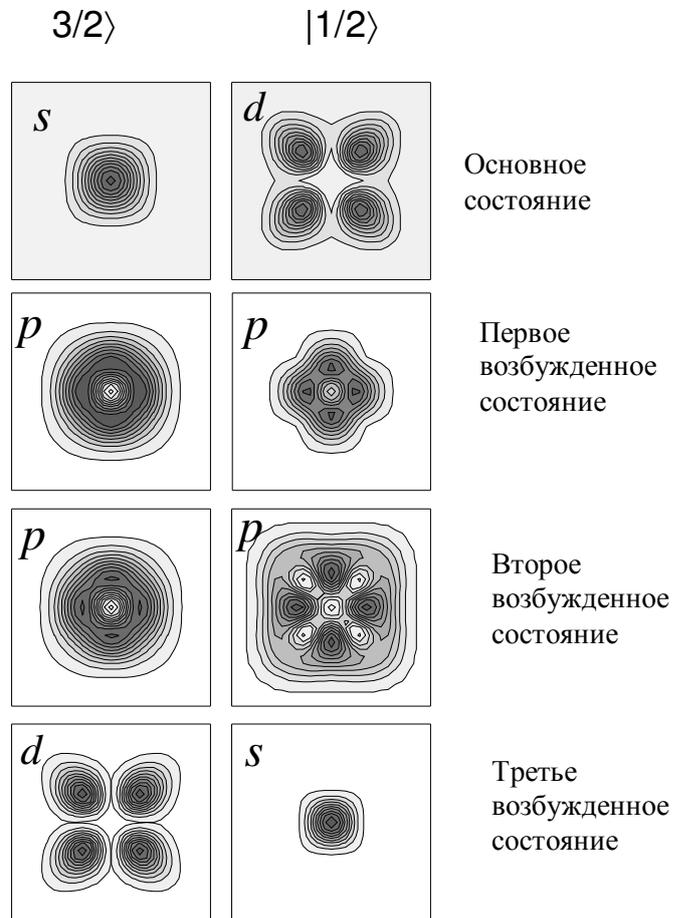


Рис.3.3.1. Волновые функции первых четырех уровней дырки в Ge квантовой точке. Показано разложение на две составляющие: на компоненту тяжелой дырки $|3/2\rangle$ и на компоненту легкой дырки $|1/2\rangle$. Первое и третье возбужденные состояния вносят наиболее существенный вклад в изменение основного состояния в магнитном поле.

поляризации фонона, \mathbf{q} - волновой вектор фонона, $a_{\mathbf{q}}^+$ и $a_{\mathbf{q}}$ — операторы рождения и уничтожения фононов.

Мы использовали стандартную форму оператора электрон-фононного взаимодействия для состояний в валентной зоне в базисе sp^3 [41]:

$$H_{\mathcal{F}} = \begin{pmatrix} l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{xz} & 0 \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} & 0 \\ n\varepsilon_{xz} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_v\varepsilon \end{pmatrix} \quad (3.3.3)$$

Вероятность перехода между состояниями со спином вверх $|\uparrow\rangle$ и спином вниз $|\downarrow\rangle$ определяется золотым правилом Ферми:

$$\Gamma = \sum_{q n_q} \frac{2\pi}{\hbar} |M_q|^2 \delta(\hbar s q - E_z), \quad (3.3.4)$$

здесь M_q – матричный элемент оператора взаимодействия с фононами, E_z – энергия зеемановского расщепления, s - скорость звука. Принят линейный закон дисперсии для фононов, так как рассматриваются только длинноволновые фононы. Матричный элемент перехода между состояниями со спином вверх $|\uparrow\rangle$ и спином вниз $|\downarrow\rangle$ с испусканием фонона имеет следующее выражение:

$$M_q = \sqrt{\frac{\hbar(n_q+1)}{2\rho\omega_q}} \frac{i}{2} \langle \uparrow | D^{ij} | \downarrow \rangle (q_i (e_q)_j + q_j (e_q)_i).$$

Подставив выражение для матричного элемента перехода M_q в выражение (3.3.4) получаем

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar}{2\rho\omega_q} \frac{(n_q+1)}{(2\pi)^3} \langle D_{\Omega} \rangle^2 \int q^4 \delta(\hbar s q - E_z) dq, \quad (3.3.5)$$

где величина $\langle |D_\Omega|^2 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int |\langle \uparrow | D^{ij} | \downarrow \rangle|^2 (n_i(e_q)_j + n_j(e_q)_i)^2 d\Omega$ получена при интегрировании по всем направлениям единичного вектора \mathbf{n} . При учёте процессов с поглощением фононов вместо $(n_q + 1)$ в формуле (3.3.5) появится $(2n_q + 1)$.

Для того, чтобы выяснить функциональную зависимость вероятности перехода от магнитного поля мы упростили формулу (3.3.5) до следующей:

$$\Gamma = \frac{(2n_q + 1) \langle |D_\Omega|^2 \rangle q_0^4}{2\pi \rho \omega_q \hbar s} = \frac{(2n_q + 1) \langle |D_\Omega|^2 \rangle E_z^3}{2\pi \rho s_i^5 \hbar^4}. \quad (3.3.6)$$

здесь $q_0 = E_z / \hbar s$.

На первый взгляд формула (3.3.6) демонстрирует третий порядок степенной зависимости от магнитного поля, но в матричном элементе $\langle |D_\Omega|^2 \rangle$ скрыта квадратичная зависимость, поскольку изменение волновых функций $\delta\psi$ линейно зависит от магнитного поля (вплоть до полей $H \sim 10$ Тл.)

$$\psi = \psi_0 + \delta\psi(H).$$

Таким образом, зависимость темпа спиновой релаксации от магнитного поля описывается степенной функцией $\Gamma \sim H^5$. Расчеты по формуле (3.3.6) в магнитном поле $H=1$ Тл при температуре $T=4$ К дали значение времени спиновой релаксации для основного состояния около ~ 1.4 миллисекунды.

Итак, в первом порядке теории возмущений время спиновой релаксации $\tau^{(1)}$ выражается как функция магнитного поля и температуры следующим образом:

$$\tau^{(1)} = \frac{A^{(1)}}{H^5 (2n_q + 1)},$$

где n_q - число фононов в колебательной моде с энергией фонона, равной энергии зеемановского расщепления E_z , численный параметр $A^{(1)} = 1.8 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1} \text{ Тл}^5$ для квантовой точки с типичными параметрами: $h=1.5$ нм, $l=15$ нм, имеющей форму пирамиды с квадратным основанием, выращенной на смачивающем слое толщиной 0.7 нм. Таким образом, $\tau^{(1)}$

стремится к константе при $T \rightarrow 0$ (спонтанные переходы) и $\tau^{(1)} \sim 1/T$ при достаточно высоких температурах (вынужденные переходы).

Проанализируем, какие компоненты тензора деформации дают преимущественный вклад в темп спиновой релаксации. Включение независимо различных компонент ε_{ij} в гамильтониане (3.3.3) показало, что основной вклад в спиновую релаксацию дают компоненты: ε_{xz} , ε_{yz} . Этот результат можно понять, если вспомнить, что именно эти компоненты перемешивают состояния подзон лёгких и тяжёлых дырок [41]. То есть спиновая релаксация в магнитном поле происходит за счет следующих факторов: во-первых, магнитное поле индуцирует подмешивание возбуждённых состояний, во-вторых, деформации создаваемые фононной волной меняют со временем содержание лёгкой дырки в полной волновой функции носителя в квантовой точке. Это и приводит к спиновой релаксации за счет взаимодействия с фононами.

Отсюда можно сделать вывод, что для возбужденных состояний время спиновой релаксации должно быть меньше, поскольку содержание лёгкой дырки в данных состояниях больше. Действительно расчёты для первого возбуждённого состояния дают время спиновой релаксации на порядок меньшее, $\tau = 0.37$ мс.

На следующем этапе при вычислении времени спиновой релаксации для основного состояния были учтены двухфононные (рамановские) процессы. В этом случае процесс релаксации идет через промежуточное возбужденное состояние. Носитель заряда совершает переход из основного состояния в возбуждённое и в обратном направлении, что сопровождается поглощением фонона с частотой ω_q и испусканием фонона с частотой $\omega_{q'}$. Переворот спина может произойти на любом из двух этапов. Условие, обеспечивающее сохранение энергии записывается в виде $\omega_{q'} - \omega_q = \omega$, где $\hbar\omega = E_z$. Вероятность рамановских процессов определяется как:

$$\Gamma^{(2)} = \sum_{q, q', e_q, e_{q'}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_j \frac{\langle f | H_\varepsilon(\omega_{q'}) | j \rangle \langle j | H_\varepsilon(\omega_q) | i \rangle}{E_i - E_j \mp \hbar\omega_q} \right|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega_q \mp \hbar\omega_{q'}); \quad (3.3.7)$$

здесь оператор H_ε описывает электрон-фононное взаимодействие, j - номер возбуждённого состояния, суммирование ведётся по волновым векторам и по их поляризациям.

Запишем вероятность переворота спина как вероятность перехода из состояния $|\downarrow\rangle$ через промежуточное возбуждённое состояние в состояние $|\uparrow\rangle$ в следующем виде:

$$\Gamma_{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{2\pi^3 \rho^2 s^3} \left| \sum_j \frac{\langle D_{\Omega_q} \rangle \langle D_{\Omega_{q'}} \rangle}{(E_0 - E_j)} \right|^2 \int_0^\infty q^3 \left(q + \frac{E_z}{\hbar s} \right)^3 \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar s q}{kT}} - 1 \right)} \frac{1}{\left(1 - e^{-\left(\frac{\hbar s q + E_z}{kT} \right)} \right)} dq.$$

$$\Gamma_{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{2\pi^3 \rho^2 s^3} \left| \sum_j \frac{\langle D_{\Omega_q} \rangle \langle D_{\Omega_{q'}} \rangle}{(E_0 - E_j)} \right|^2 \cdot I.$$

Здесь мы пренебрегли слагаемым $\hbar\omega_q$ в знаменателе выражения (3.3.6); приняли, как и

раньше, линейный закон дисперсии для фононов; а выражения $n_q = \frac{1}{\left(e^{\frac{\hbar s q}{kT}} - 1 \right)}$ и

$n_q + 1 = \frac{1}{\left(1 - e^{-\left(\frac{\hbar s q + E_z}{kT} \right)} \right)}$ - числа заполнения фононов для процессов с поглощением и

испусканием фононов.

Интеграл I аппроксимируется с погрешностью не более 2% следующим выражением:

$$I \approx \left(\frac{kT}{\hbar s} \right)^7 \cdot 732 \cdot (1 + 0.5\alpha + 0.1\alpha^2 + 0.009\alpha^3),$$

где $\alpha = E_z/kT$.

Полная вероятность переворота спина складывается из вероятностей перехода из состояния

$|\downarrow\rangle$ в состояние $|\uparrow\rangle$ и обратного процесса: $\Gamma = \Gamma_{\uparrow\downarrow} + \Gamma_{\downarrow\uparrow} = \Gamma_{\uparrow\downarrow} (1 + e^{-\alpha})$, где $\Gamma_{\uparrow\downarrow} = \Gamma_{\downarrow\uparrow} \cdot e^{-\alpha}$.

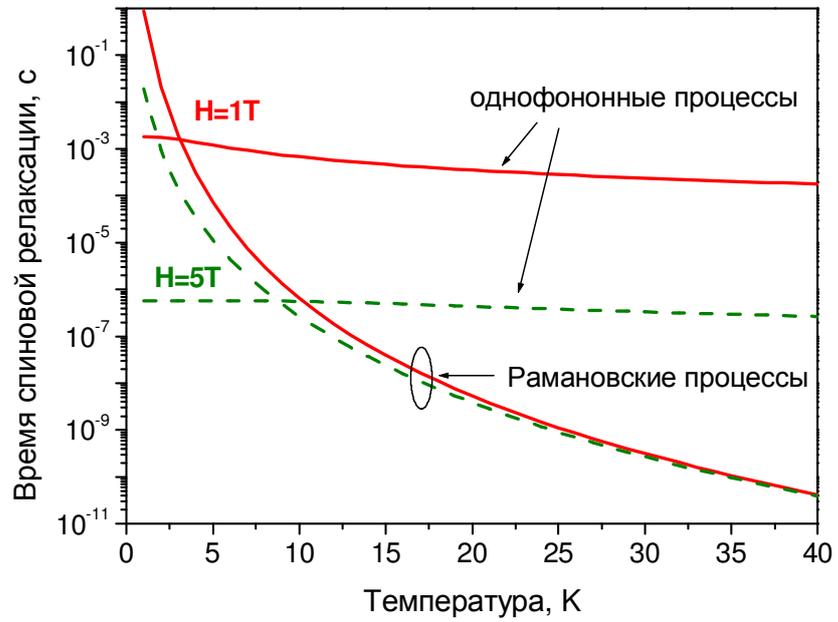


Рис.3.3.2. Время спиновой релаксации за счет взаимодействия с фононами в зависимости от температуры и магнитного поля для основного состояния дырки в Ge квантовой точке. Сплошная линия – время спиновой релаксации в магнитном поле $H=1\text{T}$, штриховая линия – в магнитном поле $H=5\text{T}$.

Таким образом, время спиновой релаксации выражается в виде:

$$\tau^{(2)} = \frac{A^{(2)}}{T^7 (1 + 0.5\alpha + 0.1\alpha^2 + 0.009\alpha^3)} \cdot (1 + e^{-\alpha}),$$

где $A^{(2)}$ не зависит от T и H . Коэффициент $A^{(2)}$ содержит матричные элементы

$$\left| \sum_j \frac{\langle D_{\Omega_q} \rangle \langle D_{\Omega_{q'}} \rangle}{(E_0 - E_j)} \right|^2$$

и может быть получен численно. Согласно расчётам $A^{(2)} = 14 \text{ с}^{-1} \text{ К}^7$ для

типичной Ge КТ. Для $T=4 \text{ К}$ и $H=1 \text{ Тл}$ время $\tau^{(2)} \sim 0.3 \text{ мс}$.

Как мы видим, при учёте рамановских процессов зависимость от температуры становится более существенной (рис. 3.3.2). Если при температуре $T=4 \text{ К}$ время спиновой релаксации для основного состояния дырки в Ge квантовой точке составляет 0.3 мс , то при $T=10 \text{ К}$ оно уже падает до 0.65 мкс . При дальнейшем повышении температуры время спиновой релаксации продолжает уменьшаться и при 20 К составляет наносекунды.

На основе анализа вероятностей переходов между состояниями $|\downarrow\rangle$ и $|\uparrow\rangle$ и всеми возбуждёнными состояниями сделан вывод, что основную роль в рамановских процессах играют третье и двенадцатое возбуждённые состояния, которые и служат промежуточными в двухступенчатых процессах релаксации. Следует также отметить, что при температурах ниже некоторой критической прямые процессы становятся определяющими. Значение такой критической температуры для поля $H=1 \text{ Тл}$ составляет 3 К . С ростом внешнего магнитного поля критическая температура увеличивается: для магнитного поля $H=5 \text{ Тл}$ $T_c=9 \text{ К}$.

В заключение скажем несколько слов об области применимости полученных результатов. Первое ограничение вытекает из условия: $\Delta E_z \ll E_0 - E_n$, то есть зеемановское расщепление должно быть меньше расстояния между уровнями квантования. Это условие хорошо выполняется вплоть до магнитных полей $H \sim 10 \text{ Тл}$. Второе ограничение вытекает из условия $\lambda \ll l$, где l - характерный размер области локализации волновой функции дырки, λ - длина волны фонона. Поскольку согласно нашим расчетам [51] область локализации

$l \approx 3$ нм, то это соответствует ограничению по температуре $T < 70$ К. И последнее ограничение связано с требованием малости следующих порядков теории возмущений. Мы рассмотрели первые два порядка теории возмущений и получили соответствующие темпы релаксации $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$. Из соображений размерности можно записать соотношение для темпа релаксации в следующем порядке теории возмущений, $\Gamma^{(3)}$:

$$\frac{\tilde{A}^{(3)}}{\tilde{A}^{(2)}} = \left(\frac{|M^{(3)}|}{|M^{(2)}|} \right)^2 \cdot \frac{(kT)^4}{\rho s^5 \hbar^3}$$

Из условия малости данного отношения находим ограничение по температуре: $T < 60$ К.

Таким образом, данный подход для расчета темпа спиновой релаксации справедлив для температур $T < 60$ К и магнитных полей вплоть до $H \sim 10$ Тл.

Длительное время релаксации за счёт прямых процессов, полученное в первом порядке теории возмущений ($\tau \sim 1$ мс), является прямым следствием того, что характер основного состояния дырки в квантовой точке близок к состоянию тяжёлой дырки. Возможность релаксации зависит от степени подмешивания состояний лёгкой дырки, и поскольку эта величина мала, то спиновая релаксация подавлена.

3.4. СПИНОВЫЙ ТРАНСПОРТ В ДВУМЕРНЫХ МАССИВАХ

Ge/Si КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

В магнитном поле транспорт в двумерных массивах может происходить в двух режимах:

- 1) Зеемановское расщепление превышает разброс уровней .
- 2) Разброс энергетических уровней превышает зеемановское расщепление в магнитном поле.

В первом случае формируется две полосы (зоны) одна со спином вверх, одна со спином вниз, внутри которых происходит транспорт. При степени заполнения меньше 1 носителя заряда, приходящегося на квантовую точку, $\nu < 1$, транспорт идёт внутри нижней зоны и не требует переворота спина. При низких температурах вероятность переворота спина мала.

При степени заполнения $\nu > 1$ нижняя зона со спином вверх (направление спина по полю) заполнена полностью. Транспорт может осуществляться только по состояниям верхней подзоны. Также могут принимать участие и носители из нижней подзоны, перешедшие за счет фононов в верхнюю подзону. При низких температурах вероятность таких процессов мала.

При степени заполнения $\nu = 1$, при отсутствии переходов в верхнюю подзону (то есть при низких температурах) транспорта нет.

Для реальных массивов квантовых точек трудно получить такую ситуацию, когда зеемановское расщепление превышает разброс уровней. Для существующих структур (разброс ~ 20 мэВ) это может быть достигнуто в полях близких к 35 Тл (здесь принято, что g -фактор носителя заряда $g \approx 10$).

Во втором случае формируется одна большая зона, внутри которой существуют и уровни со спином вверх и со спином вниз. Согласно нашим расчётам вероятность перехода с точки на точку без переворота спина будет больше чем с переворотом спина.

Существующий разброс уровней Δ только уменьшает вероятность прыжка с точки на точку

$W \sim \left(\frac{I_{ij}}{\Delta}\right)^2$ по сравнению со случаем резонансного туннелирования $W \sim I_{ij}^2$, само же

отношение вероятностей туннелирования с переворотом спина и без переворота спина остаётся таким же, как для случая резонансного туннелирования.

Рассмотрим процесс переворота спина при туннелировании с участием фононов. Благодаря существованию отличного от нуля перекрытия экспоненциальных хвостов волновых функций вероятность перехода (прыжка) между КТ имеет конечное значение:

$$\Gamma = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \left(\frac{V}{8\pi^3}\right) F(n_{\mathbf{q}}, N_i, N_j) \int |\langle H' \rangle|^2 \delta(\hbar s q - \Delta) d\mathbf{q},$$

здесь Δ – разница энергий двух туннельно-связанных квантовых точек, V – объем элементарной ячейки, s – скорость звука, а матричный элемент равен:

$$\langle H' \rangle = \langle \Psi_j | \hat{H}_\varepsilon | \Psi_i \rangle,$$

здесь \hat{H}_ε – оператор электрон-фононного взаимодействия.

Функция $F(n_{\mathbf{q}}, N_i, N_j)$ описывает все статистические факторы, от которых зависит переход: i -й центр должен заполнен, j -й центр должен быть пуст, в системе должен существовать фонон с нужной энергией. N_i, N_j – вероятности заполнения i -й и j -й точки, $n_{\mathbf{q}}$ – среднее число фононов в состоянии с импульсом \mathbf{q} . Мы будем рассматривать случай достаточно низких температур, поэтому будем учитывать только акустические фононы (оператор взаимодействия \hat{H}_ε дан в предыдущем параграфе).

С учетом туннельной связи волновые функции имеют вид:

$$\Psi_i = \psi_i + A_t \cdot \psi_j$$

$$\Psi_j = \psi_j - A_t \cdot \psi_i$$

где коэффициент туннельной связи $A_t \sim I_{ij}/\Delta$, здесь I_{ij} — интеграл перекрытия.

Существуют две возможности переворота спина при туннелировании: 1) переворот спина за счёт взаимодействия с фононами в ненулевом магнитном поле и 2) переход в состояние с противоположным спином непосредственно при туннелировании. Первый случай – это традиционный механизм переворота спина, описанный в работе [93]. Здесь за счёт внешнего магнитного поля в волновой функции появляется добавка состояния с противоположным спином, и это приводит к ненулевому матричному элементу электрон-фононного взаимодействия между состояниями с противоположными спинами.

Второй случай мы разберем в данном параграфе. В этом случае структурная асимметрия квантовой точки приводит к существованию эффективного магнитного поля, которое вызывает отклонение среднего значения спина на хвостах волновой функции от направления спина в области преимущественной локализации волновой функции [94].

Для прыжка с переворотом спина важно учесть добавку к волновой функции состояния с противоположным спином на соседней точке:

$$\begin{aligned}\Psi_i^\downarrow &= \psi_i^\downarrow + A \psi_j^\uparrow, \\ \Psi_j^\uparrow &= \psi_j^\uparrow - A \psi_i^\downarrow,\end{aligned}$$

где $A \sim I_{ij}^{\uparrow\downarrow} / \Delta$, $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ — интеграл перекрытия между состояниями с противоположными спинами в i -й и j -й квантовой точке.

Для вероятности прыжка с переворотом спина необходимо вычислить матричный элемент $\langle H' \rangle = \langle \Psi_j | \hat{H}_\varepsilon | \Psi_i \rangle$. Распишем, что представляет собой матричный элемент для процесса с поглощением фонона:

$$\langle H' \rangle = C \left[(\psi_j^\uparrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{iqr} \psi_j^\uparrow) - (\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{iqr} \psi_i^\downarrow) \right],$$

где

$$C = \frac{i}{2} \left(\frac{\hbar n_q}{2\rho_0 V \omega_q} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{I_{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \right), \quad \tilde{H}_\varepsilon = \sum_{ij} D^{ij} (q_i (e_q)_j + q_j (e_q)_i).$$

Примем, что $\psi_j(r-R) = \psi_i(r)$, где R – среднее расстояние между центрами, тогда

$$\langle H' \rangle = C \left[(\psi_j^\uparrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{iqr} \psi_j^\uparrow) - (\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{iqr} \psi_i^\downarrow) \right] = C (e^{iqR} - 1) (\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{iqr} \psi_i^\downarrow).$$

Экспоненциальный множитель e^{iqr} можно положить равным 1, если рассматривать только длинноволновые фононы с длиной волны $\lambda \gg l$, где l — характерный размер области локализации волновой функции дырки в квантовой точке. Это накладывает ограничение по температуре $T < 70$ K, если взять $l \approx 3$ нм, согласно результатам численных расчётов [51].

Квадрат матричного элемента содержит осциллирующую часть:

$$|\langle H' \rangle|^2 = C^2 \cdot (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \cdot (\psi_i^\uparrow, \tilde{H}_\varepsilon \psi_i^\uparrow)^2.$$

Поскольку эта часть знакопеременна, то не вносит существенный вклад в результирующий темп релаксации, и мы им пренебрегаем.

В результате для перехода из i -ого центра в j -й центр получаем

$$\Gamma_1 = \left(\frac{I_{ij}^{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \right)^2 \langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} F(n_q, N_i, N_j) \int q^3 \delta(\hbar sq - \Delta) d\mathbf{q}, \quad (3.4.1)$$

где величина $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} = \frac{1}{4\pi} \int |\langle \uparrow | D^{ij} | \uparrow \rangle|^2 (n_i(e_q)_j + n_j(e_q)_i)^2 d\Omega$ содержит матричный элемент деформационного потенциала между состояниями с одинаковой ориентацией спина.

Сравним полученное выражение со случаем квантовых точек, не обладающих структурной асимметрией. В этом случае отклонения среднего значения спина на хвостах волновой функции не происходит, так как нет эффективного магнитного поля. В данном случае сам процесс туннелирования не влияет на ориентацию спина, носитель остается в том же спиновом состоянии. Переворот спина может происходить только в ненулевом магнитном поле по механизму, описанному в работе [93]. Волновые функции будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \Psi_i^\downarrow &= \psi_i^\downarrow + \tilde{A} \psi_j^\downarrow, \\ \Psi_j^\uparrow &= \psi_j^\uparrow - \tilde{A} \psi_i^\uparrow, \end{aligned}$$

где коэффициент туннельной связи $\tilde{A} \approx I_{ij}^{\uparrow\uparrow} / \Delta$, здесь $I_{ij}^{\uparrow\uparrow}$ — обычный интеграл перекрытия без учета спинового состояния.

Внешнее магнитное поле индуцирует подмешивание возбужденных состояний (см. формулу (3.3.2)) и за счёт этого в волновой функции состояния со спином *вверх* появляется добавка состояния со спином *вниз* и наоборот. Тогда матричный элемент электрон-фононного взаимодействия между волновыми функциями с различной спиновой ориентацией отличен от нуля:

$$\langle H' \rangle = \tilde{A} \left((\psi_j^\downarrow \hat{H}_\varepsilon \psi_j^\uparrow) - (\psi_i^\uparrow \hat{H}_\varepsilon \psi_i^\downarrow) \right),$$

откуда

$$|\langle H' \rangle|^2 = \tilde{C}^2 \cdot (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \cdot (\psi_i^\uparrow \hat{H}_\varepsilon \psi_i^\downarrow)^2,$$

где \tilde{C}^2 содержит \tilde{A}^2 .

Из этого выражения ясно, что вычисление вероятности переворота спина при туннелировании сводится к вычислению матричного элемента $\langle \uparrow | H_\varepsilon | \downarrow \rangle$ внутри одного центра и коэффициента туннельной связи между центрами. Таким образом, вероятность переворота спина при переходе между симметричными точками определяется следующим выражением:

$$\Gamma_2 = \left(\frac{I_{ij}^{\uparrow\uparrow}}{\Delta} \right)^2 \langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} F(n_q, N_i, N_j) \int q^3 \delta(\hbar s q - \Delta) d\mathbf{q}, \quad (3.4.2)$$

где величина

$$\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{4\pi} \int |\langle \uparrow | D^{\hat{j}} | \downarrow \rangle|^2 (n_i(e_q)_j + n_j(e_q)_i)^2 d\Omega$$

содержит матричный элемент деформационного потенциала между состояниями с противоположной ориентацией спина.

Таким образом, выражения (3.4.1) и (3.4.2) аналогичны по своей структуре, отличие заключается в интегралах перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ и $I_{ij}^{\uparrow\uparrow}$ и в матричных элементах $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}$ и $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}$. Для расчёта данных матричных элементов мы использовали стандартную форму оператора электрон-фононного взаимодействия для состояний в валентной зоне в базисе sp^3 [41]. Различие матричных элементов $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}$ и $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}$ можно найти из изменения волновых функции в магнитном поле: $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \sum_i \alpha_i(H) \cdot |\psi_i\rangle$.

Добавка состояния с противоположным спином пропорциональна $\alpha(H)$, поэтому отношение матричных элементов $\frac{\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}}{\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}} \sim \alpha^2(H)$. В слабых магнитных полях α пропорциональна магнитному полю H и составляет $\alpha \sim 10^{-4}$ при $H=1$ Тл, согласно расчётам волновых функций методом сильной связи.

Таким образом, можно сразу провести сравнение двух механизмов спиновой релаксации: 1) за счёт структурной асимметрии квантовой точки и 2) за счёт модификации волновых функций внешним магнитным полем. Квадраты интегралов перекрытия отличаются на 2 порядка, а квадраты матричных элементов деформационных потенциалов на 8 порядков (в магнитном поле $H=1$ Тл). В результате $\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} = 10^6$, и темп спиновой релаксации по первому механизму на 6 порядков выше, чем темп спиновой релаксации по второму механизму. То есть структурная асимметрия квантовой точки приводит к стимуляции процессов спиновой релаксации при туннелировании между квантовыми точками.

Далее проведем расчёт времени спиновой релаксации за счёт структурной асимметрии Ge квантовой точки для характерных экспериментальных параметров массивов Ge КТ. В области температур 4К-20К транспорт в массиве Ge квантовых точек осуществляется в режиме проводимости с переменной длиной прыжка, переходы происходят внутри

оптимальной энергетической полосы шириной $\varepsilon_0 = \frac{(kT)^{2/3}}{(g(\mu)a^2)^{1/3}}$ [95], где $g(\mu)$ – плотность состояний на уровне Ферми без учета кулоновской щели, a – радиус локализации. Например, при температуре $T = 4$ К ($kT \approx 0.34$ мэВ) ε_0 составляет 1.4 мэВ, а при температуре $T = 10$ К ($kT \approx 0.86$ мэВ) $\varepsilon_0 \approx 8.5$ мэВ. Будем использовать данные значения как характерную разницу энергий i -ого и j -ого центров.

Основное влияние на конечный результат оказывает величина интегралов перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$. Она имеет экспоненциальную зависимость от расстояния между центрами. Расстояние между точками, связанными туннельной связью, может варьироваться в массиве в пределах 20%. На рисунке 3.4.1 показано распределение расстояний между соседними квантовыми точками в одном из реальных массивов КТ. Как видно из рисунка, существует характерное среднее расстояние между точками, близкое по значению к среднему размеру квантовой точки в массиве. Этому расстоянию соответствует интеграл перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow} \sim 10^{-6}$ эВ. Для такого значения $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ минимальное время спиновой релаксации составляет $\tau_s \approx 10^{-5}$ с при температуре $T = 4$ К ($\varepsilon_0 \approx 1$ мэВ). Если же рассматривать хвосты распределения, то им соответствуют как ультракороткие времена спиновой релаксации, так и крайне длинные. Например, для расстояния между точками $d = 10$ нм интеграл перекрытия достигает $I_{\uparrow\downarrow} \approx 10^{-3}$ эВ (рис. 3.4.2), соответственно время спиновой релаксации при туннелировании составит $\tau_s = 10^{-11}$ с. Но, как правило, такие маленькие квантовые точки не принадлежат перколяционному кластеру из-за большого отклонения положения энергетического уровня от среднего, и поэтому не участвуют в спиновом транспорте.

Исследована зависимость времени спиновой релаксации от магнитного поля и температуры (рис. 3.4.3). Следует сразу отметить, что зависимости построены для некоторого характерного перехода $i \rightarrow j$. Температурная зависимость в этом случае является

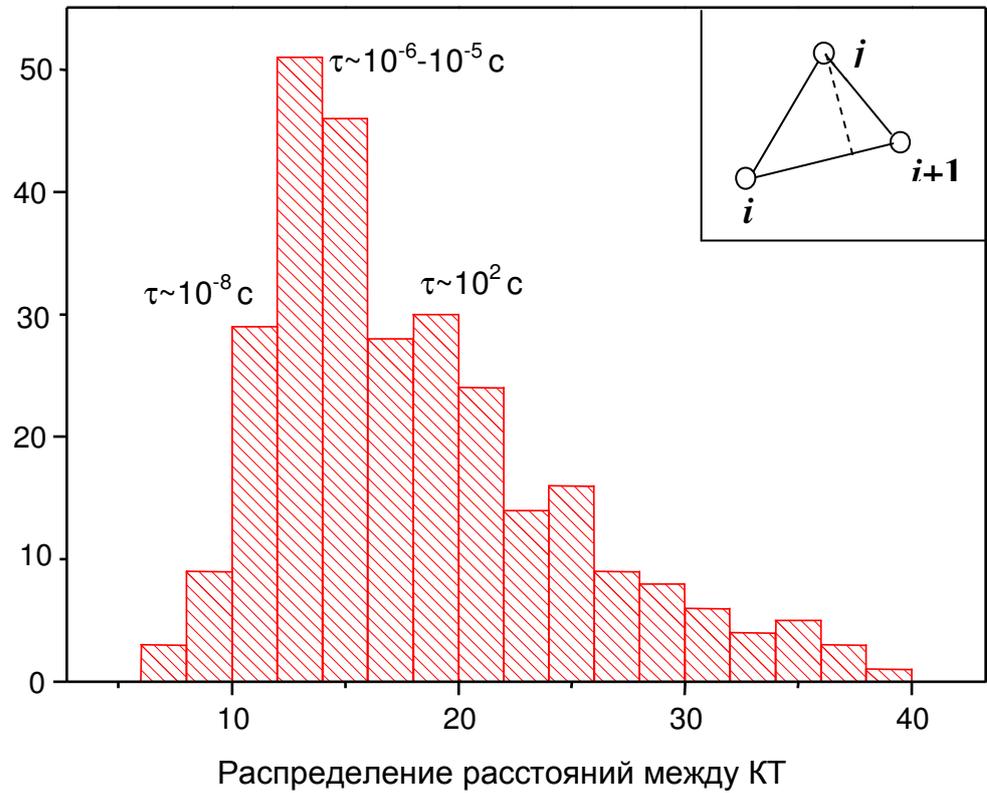


Рис. 3.4.1. Распределение расстояний между соседними квантовыми точками в одном из реальных массивов КТ. Из рассмотрения исключены такие пары точек i и $i+1$, что расстояние между соединяющим их отрезком и любой другой точкой j меньше 10 нм (см. вставку). На гистограмме указаны характерные времена спиновой релаксации для расстояний 10, 15, 20 нм.

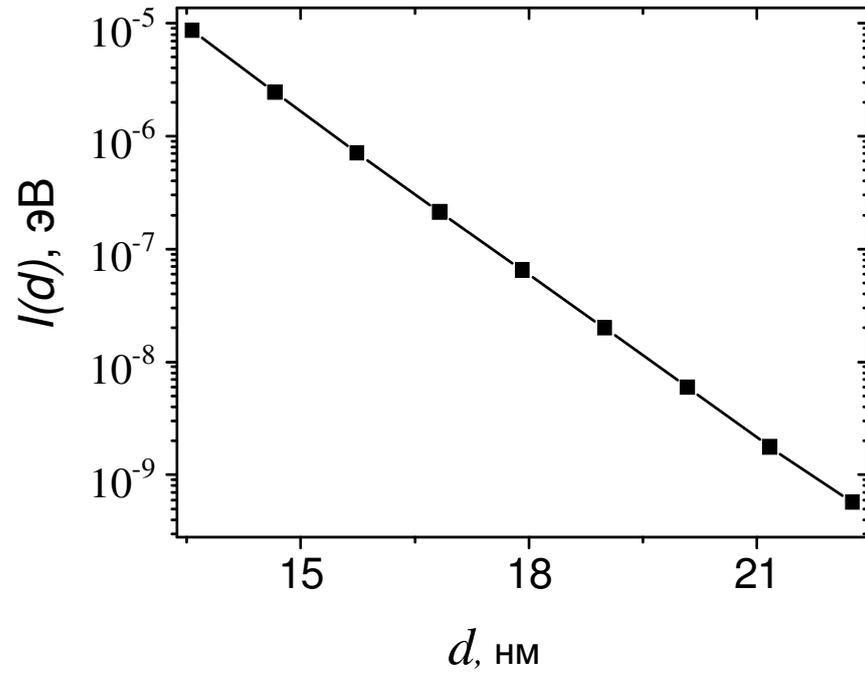


Рис. 3.4.2. Зависимость интеграла перекрытия I основных состояний дырок от расстояния d между центрами Ge нанокластеров.

отражением зависимости от температуры функции $F(n_q, N_i, N_j)$, включающую в себя функции распределения Ферми и Бозе. Если же рассматривать температурную зависимость для переноса спина через весь массив КТ, то при низких температурах она, так же как и сопротивление массива, будет определяться законом Эфроса-Шкловского $\tau_s^{-1} \sim \exp[-(T/T_0)^{1/2}]$ [95]. Это становится очевидным, если обратить внимание на то, что вероятность переворота спина при переходе $i \rightarrow j$ определяется точно таким же выражением, как и вероятность самого перехода, отличие только в коэффициенте $A_i^2 = \left(\frac{I_{ij}^{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \right)^2$. При рассмотрении случая потери спиновой ориентации при случайном блуждании по массиву КТ главную роль для спиновой релаксации будут играть переходы между квантовыми точками, имеющими сильную туннельную связь (наибольшие интегралы перекрытия). В таких парах точек спиновая релаксация будет происходить наиболее эффективно. В данном случае температурная зависимость спиновой релаксации будет определяться именно такими переходами, точнее зависимостью $F(n_q, N_i, N_j)$ для таких переходов.

Зависимость скорости спиновой релаксации от магнитного поля для отдельного перехода $i \rightarrow j$ представляет собой куполообразную кривую (рис.3.16) с максимумом при некотором характерном магнитном поле. Значение этого магнитного поля определяется энергетическим зазором $\Delta = \varepsilon_j - \varepsilon_i$, где ε_i и ε_j - энергии уровней в i -ой и j -ой точке. Мы рассмотрели простой случай, когда уровень Ферми совпадает с серединой энергетического зазора Δ , когда i -ая точка заполнена, а j -ая точка пуста. При увеличении магнитного поля энергетический зазор между состоянием со спином *вверх* в i -ой точке $|i, \uparrow\rangle$ и состоянием со спином *вниз* в j -ой точке $|j, \downarrow\rangle$ уменьшается, что приводит к возрастанию интенсивности перехода. При величине зеемановского расщепления $E_z = \Delta$ наблюдается резонансное туннелирование с переворотом спина. Дальнейшее увеличение магнитного поля приводит к росту энергетического зазора между этими состояниями и к падению интенсивности

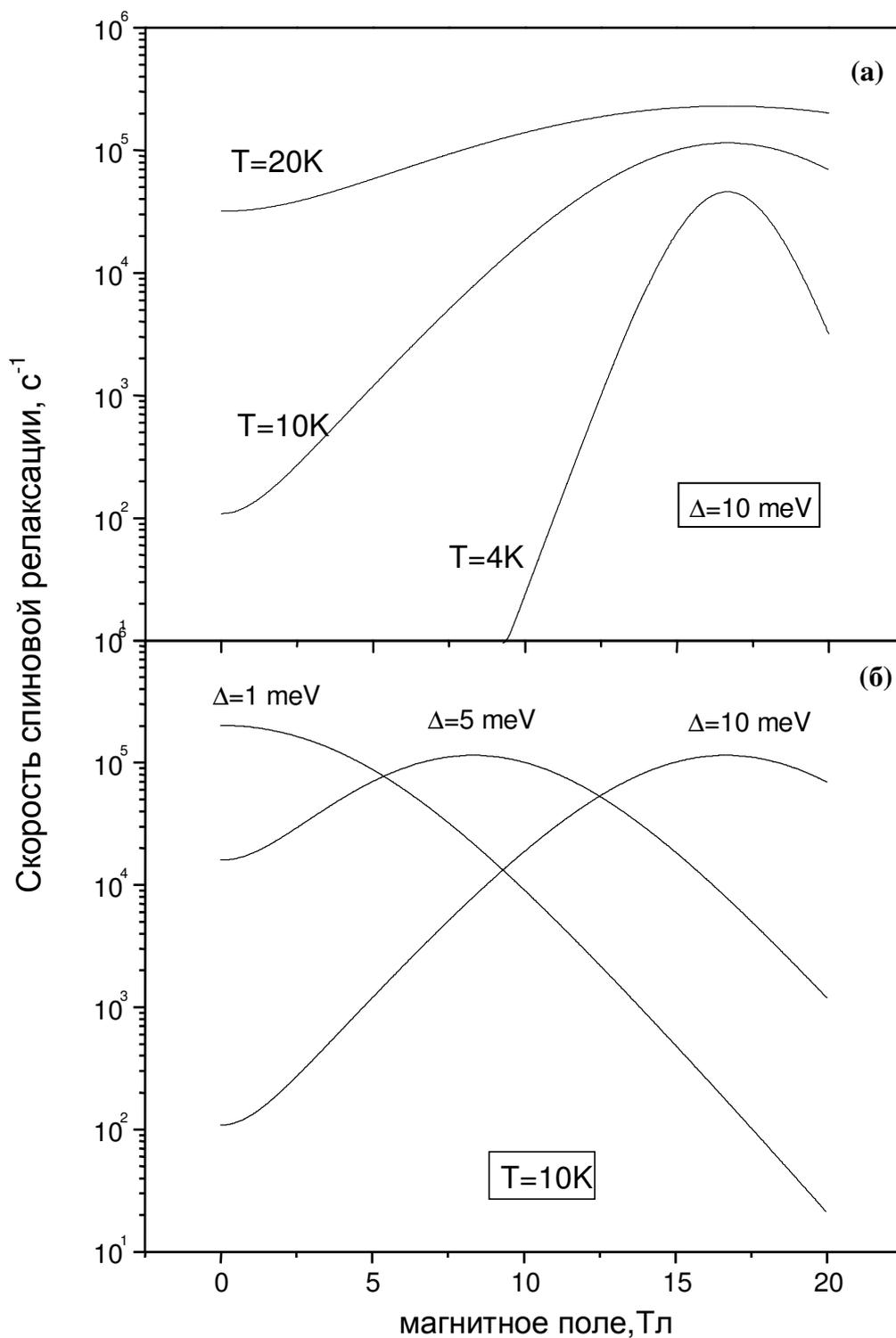


Рис.3.4.3. Зависимость скорости спиновой релаксации от магнитного поля для различных температур (а) и энергетических зазоров (б) при туннелировании между квантовыми точками.

перехода.

Экспериментальное изучение этой зависимости в реальном массиве КТ представляется затруднительным, поскольку из-за разброса по энергиям каждая пара точек будет иметь свой энергетический зазор Δ и свое положение максимума (рис. 3.4.3 (б)). В результате, в малых полях будет наблюдаться некое среднее значение темпа спиновой релаксации, близкое к максимальному. При дальнейшем увеличении магнитного поля время спиновой релаксации будет следовать тем же закономерностям, что и сопротивление массива КТ. Как правило, здесь играют роль такие факторы, как сжатие волновых функций в магнитном поле, и увеличение энергетического зазора между разными спиновыми состояниями с ростом магнитного поля.

На последнем этапе проведено исследование методом Монте-Карло процессов спиновой релаксации при случайном блуждании носителя заряда в неупорядоченном массиве туннельно-связанных Ge квантовых точек, на основе подхода, аналогичного модели сетки сопротивлений Миллера и Абрахамса [91], включающего в рассмотрение спиновую степень свободы. Рассматривается двумерный массив квантовых точек, равномерно распределенных в плоскости. Расстояние между центрами соседних квантовых точек принято равным $1/\sqrt{N}$ (где N – плотность квантовых точек) плюс случайная добавка, имеющая гауссово распределение. Чтобы учесть дисперсию размеров квантовых точек, существующую в реальных структурах, каждому узлу приписывается случайная величина энергии, которая определяется как энергия размерного квантования в квантовых точках с данными размерами. Моделирование показало, что движение спин-поляризованных дырок по механизму прыжковой проводимости сопровождается поворотом вектора спиновой поляризации вдоль направления движения (Рис. 3.4.4). Максимальное расстояние, пройденное дыркой с сохранением заметной спиновой поляризации, оказалось порядка d/φ , где d – среднее расстояние между квантовыми точками, φ – угол поворота спина при одном акте туннелирования. Для массива квантовых точек с плотностью $3 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ это расстояние

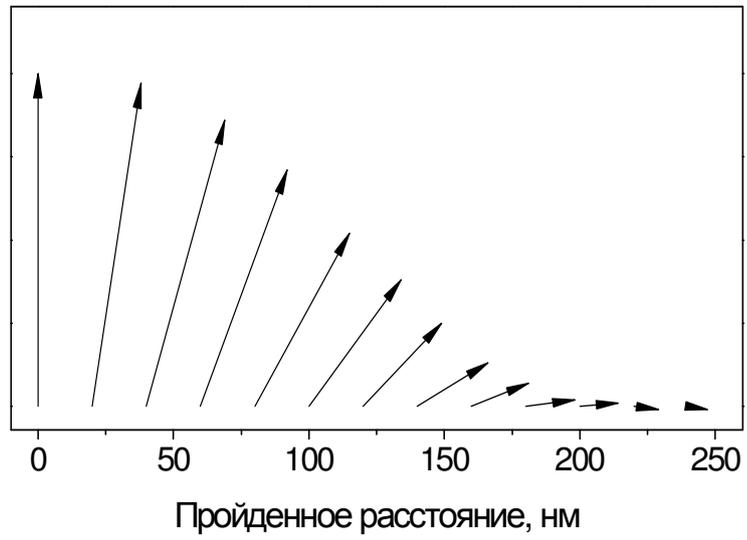


Рис.3.4.4. Поворот вектора J ($J_{||}$, J_z) при прыжковом транспорте в неупорядоченном массиве Ge КТ

равно ~ 0.2 микрона (длина спиновой диффузии). При наличии магнитного поля скорость релаксации спина может значительно возрасти, так как в релаксацию начинают давать вклад прыжки «туда-обратно» в комбинации с ларморовской прецессией спина.

Обсудим другие механизмы спиновой релаксации, играющие роль при спиновом транспорте в массивах Ge КТ. Переворот спина может произойти на двух этапах транспорта: либо когда носитель локализован внутри квантовой точки, либо при туннелировании между двумя квантовыми точками. Переворот спина внутри квантовой точки может стать основным каналом спиновой релаксации при малых значениях интегралов перекрытий. Он детально был рассмотрен в предыдущем параграфе и в работе [96]. Основным механизмом спиновой релаксации в данном случае является взаимодействие с фононами. Наряду с фононным механизмом в определённых условиях может проявиться механизм спиновой релаксации, связанный с флуктуациями электрического поля за счёт быстрых перемещений зарядов в массиве квантовых точек [97]. Описание данного механизма дано в **приложении А**. Условием проявления флуктуационного механизма является существование в массиве достаточного количества пар точек, связанных сильной туннельной связью, имеющих общий электрон (дырку) и играющих роль флуктуаторов. Данный механизм может стать определяющим при низких температурах ($T \leq 4\text{K}$). Спиновая релаксация за счёт сверхтонкого взаимодействия $\hat{H} = A \cdot \hat{S} \cdot \hat{I}$ является несущественной для локализованных дырочных состояний в Ge КТ. Дырочные состояния построены в основном из p -орбиталей, для которых константа сверхтонкого взаимодействия $A \approx \psi^2(r_n) = 0$, где r_n – радиус-вектор некоторого ядра.

Таким образом, в малых магнитных полях ($H \sim 1$ Тл) при температурах около 4 К в типичных массивах Ge КТ основным механизмом спиновой релаксации будет переворот спина при туннелировании между квантовыми точками.

ВЫВОДЫ К ГЛАВЕ 3

Исследованы процессы спиновой релаксации в системе Ge/Si с квантовыми точками. Выявлены два основных механизма спиновой релаксации. В массивах с малой плотностью КТ основным является механизм релаксации внутри квантовой точки за счёт взаимодействия с фононами. В плотных массивах КТ основным является прецессионный механизм релаксации при туннельных переходах между КТ. Найдена вероятность переворота спина при резонансном туннелировании между двумя Ge квантовыми точками пирамидальной формы. Показано, что вероятность переворота спина при туннелировании зависит от размера и геометрии квантовой точки: при увеличении отношения высоты квантовой точки к размеру её основания вероятность переворота спина возрастает. Найдена связь между вероятностью переворота спина при туннелировании и структурной асимметрией Ge/Si квантовых точек.

Показано, что в энергетическом спектре одномерного кристалла, узлами которого являются Ge/Si квантовые точки, присутствует спиновое расщепление, связанное с отсутствием у квантовых точек зеркальной симметрии относительно плоскости роста (100). При туннелировании носителей заряда между двумя квантовыми точками это эквивалентно эффективному магнитному полю, аналогичному полю Бычкова-Рашба. Направление данного поля перпендикулярно направлению туннелирования и лежит в плоскости (100).

Установлено, что структурная асимметрия Ge/Si квантовой точки приводит к усилению темпа спиновой релаксации при прыжковом транспорте дырок в двумерных массивах квантовых точек во внешнем магнитном поле. Темп релаксации в массиве квантовых точек, обладающих структурной асимметрией, на 6 порядков превышает темп релаксации в массиве симметричных КТ во внешнем магнитном поле ~ 1 Тл.

ГЛАВА 4. ЭЛЕКТРОНЫ В СИСТЕМЕ С Ge/Si КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

4.1. Постановка задачи

Для успешного управления спином необходимо знать такие фундаментальные спиновые свойства, как эффективный g -фактор, который определяет продолжительность π -импульса для переворота спина, и время спиновой релаксации. Одним из методов дающих информацию об этих величинах является метод электронного парамагнитного резонанса. Он был с успехом применен к электронам в двумерных квантовых ямах. Однако эффективность применения метода ЭПР для исследования квантовых точек, полученных в результате самоорганизации, до недавнего времени вызывало большие сомнения. Считалось, что дисперсия по размерам квантовых точек приведёт к разбросу g -факторов, что вызовет уширение ЭПР-линии и сделает невозможной регистрацию ЭПР. Недавно были предприняты попытки создания упорядоченных массивов квантовых точек в системе Ge/Si и исследования методом ЭПР электронных состояний, локализованных на квантовых точках [62]. В квантовых точках Ge/Si электрон главным образом локализован в кремнии, что, несомненно, привлекательно для практического использования в элементарной ячейке квантового компьютера. Результаты проведенных исследований [62] довольно противоречивы. Во-первых, g -фактор полученного ЭПР-сигнала составляет 1.998, что близко к значению g -фактора для свободных электронов в кремнии. Во-вторых, g -фактор имеет изотропную угловую зависимость, что также приводит к выводу о неэффективной локализации электронов. В-третьих, время спиновой релаксации спина составило порядка микросекунды, что значительно меньше ожидаемого времени для электрона, локализованного в Si, и более характерно для двумерных электронов. Однако, наблюдаемый ЭПР-сигнал хорошо соотносится с числом квантовых точек в образце так же, как и с числом электрон-дырочных пар, произведенных облучением светом с энергией меньше E_g (электроны поставлялись в слой квантовых точек путем генерации светом).

Данные противоречия не позволяют сделать заключение о том, что достигнута эффективная локализация электронов на квантовых точках и о действительном отношении полученного сигнала к локализованным электронам. Необходимо создание новых гетероструктур с Ge/Si квантовыми точками, где локализация электронов на квантовых точках будет более эффективной и проведение новых, более тщательных исследований методом ЭПР.

4.2. Экспериментальные результаты исследований методом ЭПР электронов, локализованных вблизи Ge/Si квантовых точек

В данном параграфе изложены результаты исследований электронных состояний в структурах с Ge/Si квантовыми точками методом ЭПР и дано обсуждение результатов.

В случае электрона, локализованного вблизи Ge квантовой точки, квантовая яма формируется за счёт деформационных полей, возникающих из-за рассогласования постоянных решеток Ge и Si. Наибольшие деформации возникают вблизи вершины пирамиды, представляющей Ge квантовую точку и под её основанием (рис.4.2.1). То есть для электронов формируются две квантовые ямы приблизительно одинаковой глубины, вблизи вершины квантовой точки и под её основанием. Несмотря на достаточную глубину квантовых ям $U \sim 160$ мэВ, глубина залегания уровней оказывается небольшой $E \sim 10$ мэВ [98], из-за малой эффективной ширины квантовых ям ($d \sim 2-3$ нм). Поскольку энергия связи электронов вблизи Ge/Si КТ составляет всего порядка 10 мэВ, то существует проблема обеспечить захват электронов на квантовые точки. Для исследования электронных состояний вблизи Ge квантовых точек необходимо легировать образец, то есть ввести в объем образца донорную примесь. Глубина донорного уровня для таких традиционных примесей, как Sb или P, составляет около 40-45 мэВ [78]. При понижении температуры электроны будут локализоваться на более глубоких донорных уровнях, а не на мелких уровнях на квантовых точках. Поэтому необходимо эффективно увеличить глубину ямы для электронов вблизи квантовых точек. Одним из способов решения проблемы является создание многослойных когерентных структур с квантовыми точками, в которых деформационные поля складываются, что приводит к увеличению глубины потенциальной ямы. В результате проведенных исследований с помощью емкостной спектроскопии и спектроскопии адмиттанса [99] показано, что в структурах с 4 слоями Ge квантовых точек происходит локализация электронов в кремнии. Основным требованием к данной структуре является

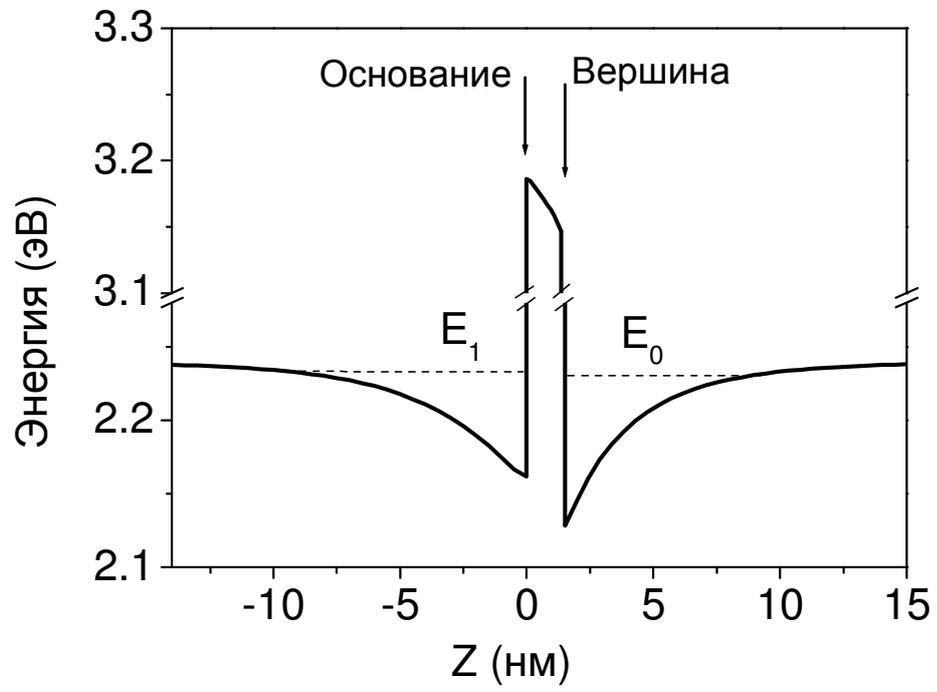


Рис.4.2.1. Профиль потенциала вдоль оси $Z \parallel [001]$ вблизи Ge/Si квантовой точки. Высота КТ $h=1.5$ нм, размер основания $l=15$ нм.

малое расстояние между слоями квантовых точек для того, чтобы деформационное поле от одного слоя эффективно влияло на рост и расположение квантовых точек в другом слое. В нашей структуре расстояние между первым и вторым слоями составляло 3 нм, между вторым и третьим – 5 нм, а между третьим и четвертым – 3 нм. Согласно расчётам, проведенным методом эффективной массы, локализация электрона происходит в слое Si между вторым и третьим слоями квантовых точек, и энергия связи составляет $\approx 50-60$ мэВ. [100].

Второй способ решения проблемы захвата электронов на квантовые точки: создание структуры с двумерным электронным газом и помещение квантовых точек в центр проводящего канала. Глубина квантовой ямы, созданной в процессе выращивания Si на релаксированных SiGe твердых растворах, составляет около 100-150 мэВ [101]. Уровень электрона в яме вблизи квантовой точки будет заведомо ниже этого значения.

Таким образом, экспериментальные исследования электронов на Ge/Si квантовых точках проводились методом ЭПР-спектроскопии на двух типах структур: 1) 4-х слойная структура с квантовыми точками и 2) структура с двумерным проводящим каналом с квантовыми точками, введенными в центр канала. Структуры были выращены на высокоомных подложках (1000 Ом·см) Si (100) с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии. Схематическое изображение исследуемых структур показано на рис.4.2.2.

Температура роста 4-х слойной структуры составляла 500°C. Слои квантовых точек вводились в середину эпитаксиального слоя n-Si (концентрация Sb $\sim 5 \cdot 10^{16}$ см⁻³) толщиной 0.6 мкм. Толщина прослоек Si между слоями квантовых точек составляла 3 нм, 5 нм, 3 нм. Структуры с двумерным газом были выращены на релаксированных Si_{0.75}Ge_{0.25} буферных слоях. Двумерный канал формировался путем осаждения псевдоморфной пленки Si толщиной 20 нм, квантовые точки вводились в центр канала. Сверху осаждался

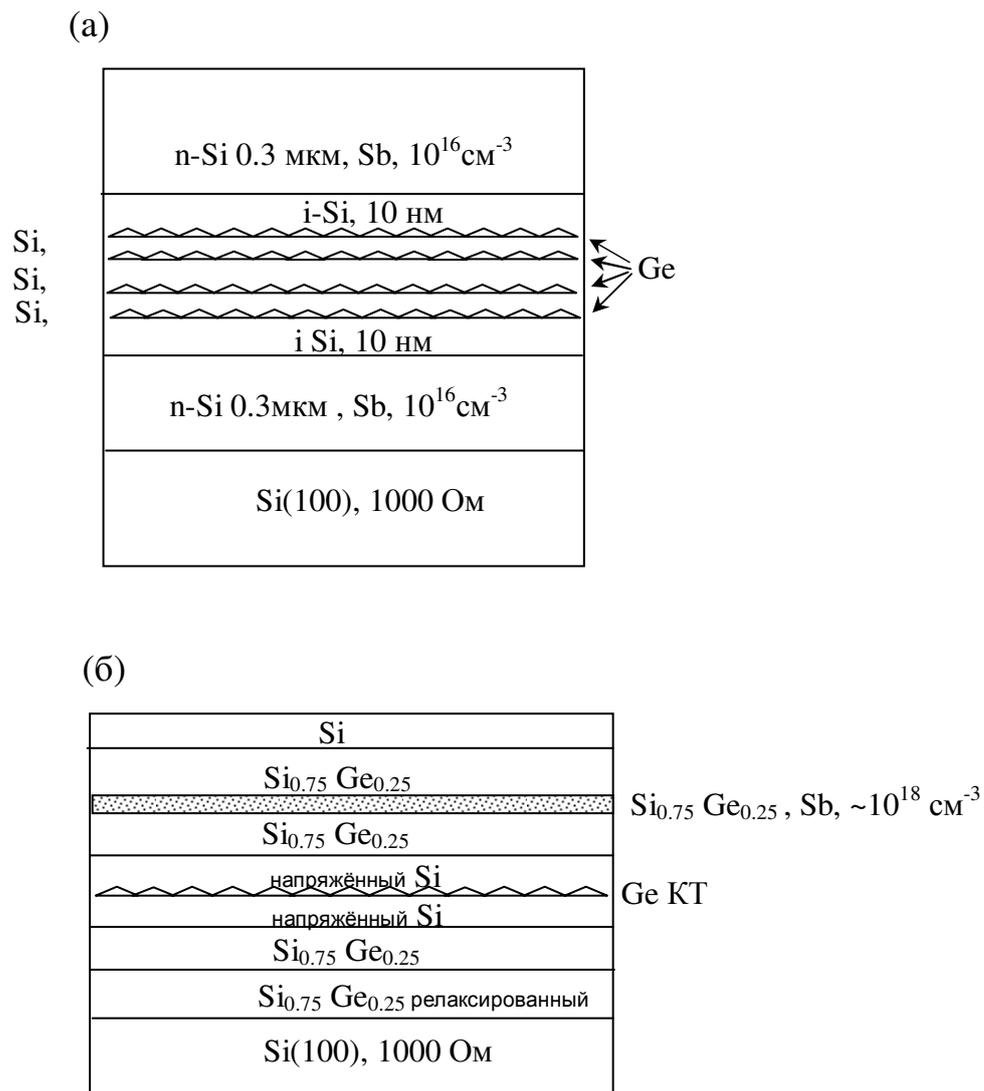


Рис.4.2.2. Схематическое изображение структур 1-ого типа (а) и 2-ого типа (б).

нелегированный слой $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ толщиной 13 нм, затем слой с тем же составом, но с концентрацией сурьмы $N(\text{Sb}) \sim 8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ толщиной 10 нм, затем нелегированный слой $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ толщиной 20 нм и, наконец, закрывающий слой Si толщиной 10 нм. Температура выращивания всех слоёв, кроме легированного и слоя квантовых точек, составляла 550°C .

Квантовые точки осаждались при температуре 300°C . Легированный слой осаждался при 350°C .

Исследования проводились на ЭПР-спектрометрах фирмы Bruker (Институт Кинетики и горения СО РАН и университет Авейро (Португалия) и на ЭПР-спектрометре фирмы VARIAN (Институт физики полупроводников СО РАН) в X-диапазоне ($\sim 9\text{ГГц}$) при температурах 4,2 К – 20 К (использовались криостаты фирмы OXFORD-instruments ESR900 и CF935). Кроме исследуемых образцов с квантовыми точками также были исследованы тестовые структуры: 4-х слойная структура без легирования, и структура с двумерным каналом без квантовых точек, выращенные при тех же условиях роста. Исследуемые образцы имели следующие геометрические размеры: $3.5 \text{ мм} \times 10 \text{ мм} \times 0.3 \text{ мм}$. Для увеличения чувствительности формировался многослойный образец, содержащий 3-4 образца с указанными размерами. Образцы крепились на длинный кварцевый стержень, который затем погружался в гелиевый криостат. Перед проведением эксперимента все образцы проходили химическую обработку: травление в течение 3-5 минут в смеси кислот $\text{HF}+4\text{HNO}_3$ для уменьшения сигнала от оборванных связей Si на поверхности образца ($g=2.0055$), при этом рабочая (эпитаксиальная) сторона образца закрывалась химически-стойким лаком. Определение параметров сигнала (g -фактора и ширины ЭПР-линии) производилось по конечному спектру, который представлял собой результат усреднения 30-50 измерений. Ошибка определения g -фактора составляла 0.0001 и определялась точностью измерений магнитного поля и частоты СВЧ-излучения. Для определения числа спинов в образце исследуемый сигнал сравнивался с сигналом от эталонного образца с известным числом спинов. Оба сигнала записывались при одинаковых экспериментальных условиях (величина

усиления сигнала, амплитуда модуляции, температура). Для этого эталон крепился на кварцевый держатель в непосредственной близости от образца, и оба сигнала записывались одновременно. Затем путем численного интегрирования площади под кривой поглощения сравнивалось количество спинов в образце и в эталоне.

Перед началом исследований были проведены теоретические оценки ожидаемого значения g -фактора для электрона, локализованного вблизи вершины Ge/Si КТ. Были рассмотрены поправки к g -фактору электрона за счёт эффекта квантования и проникновения волновой функции электрона в подбарьерную область (см. **Приложение Б**). Получено, что рассмотренные эффекты приводят к пренебрежимо малым поправкам, находящимся за пределами чувствительности современных экспериментальных методик, и компоненты g -тензора электрона, локализованного вблизи вершины Ge/Si квантовой точки, совпадают с компонентами g -тензора электрона в Si, в Δ -долине.

На обеих структурах с квантовыми точками был зафиксирован сигнал, который может быть отнесён к электронам, захваченным на квантовые точки. Форма сигнала и ширина линии практически совпадают для обоих типов структур, а g -фактор составляет $g=1.9995\pm 0.0001$ в магнитном поле, направленном вдоль оси роста структуры $Z \parallel [001]$. Ширина линии $\Delta H \approx 0.8$ Гс при $\mathbf{H} \parallel Z$, линия неоднородно уширена. На тестовых структурах подобных сигналов не наблюдается. Получена зависимость g -фактора от угла между направлением роста структуры и магнитным полем (Рис.4.2.3). Угловая зависимость g -фактора описывается $g(\theta) = \sqrt{g_{zz}^2 \cdot \cos^2(\theta) + g_{xx}^2 \cdot \sin^2(\theta)}$, где $g_{zz}=1.9995$, $g_{xx}=1.9984$. Также получена зависимость ширины линии от угла между направлением роста структуры и направлением магнитного поля (Рис.4.2.4). Наблюдается явная анизотропия, ширина линии изменяется примерно в 4 раза (Рис.4.2.5), причем наиболее узкие интенсивные ЭПР-линии наблюдаются при $\mathbf{H} \parallel Z$.

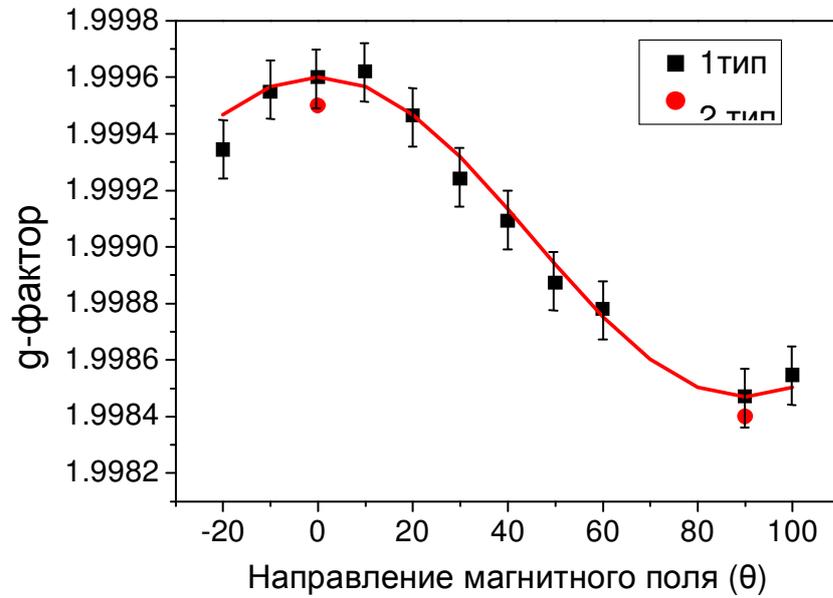


Рис.4.2.3. Зависимость g-фактора от угла наклона магнитного поля к оси роста структуры. Символы (■) соответствуют структуре 1-ого типа с 4 когерентными слоями квантовых точек, символы (●) соответствуют структуре 2-ого типа с одним слоем квантовых точек, встроенным в середину двумерного канала Si.

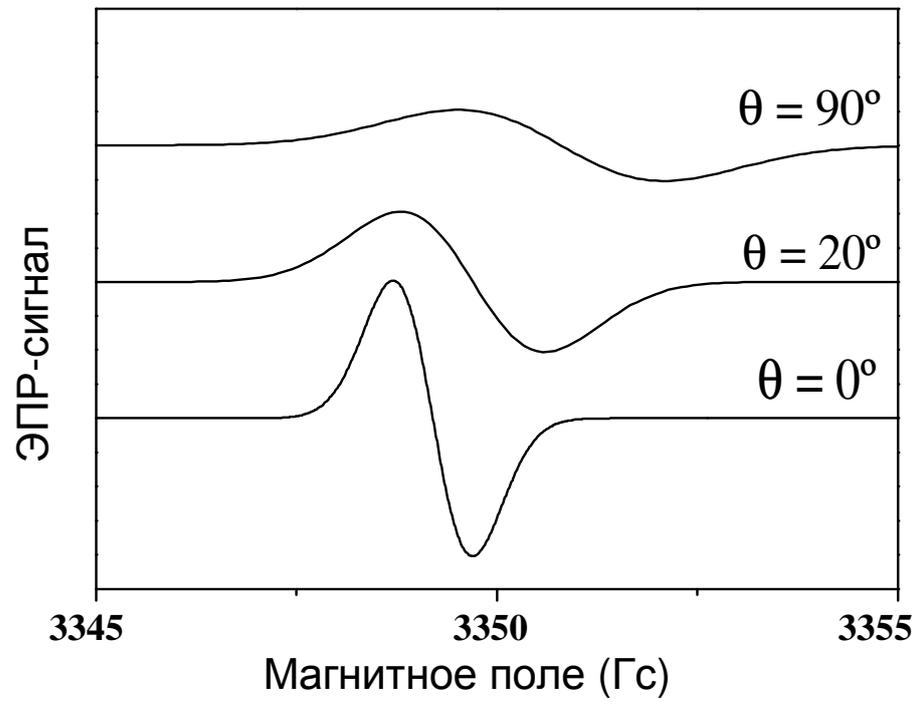


Рис. 4.2.4. ЭПР-сигнал для различных значений угла наклона магнитного поля к оси роста структуры [001].

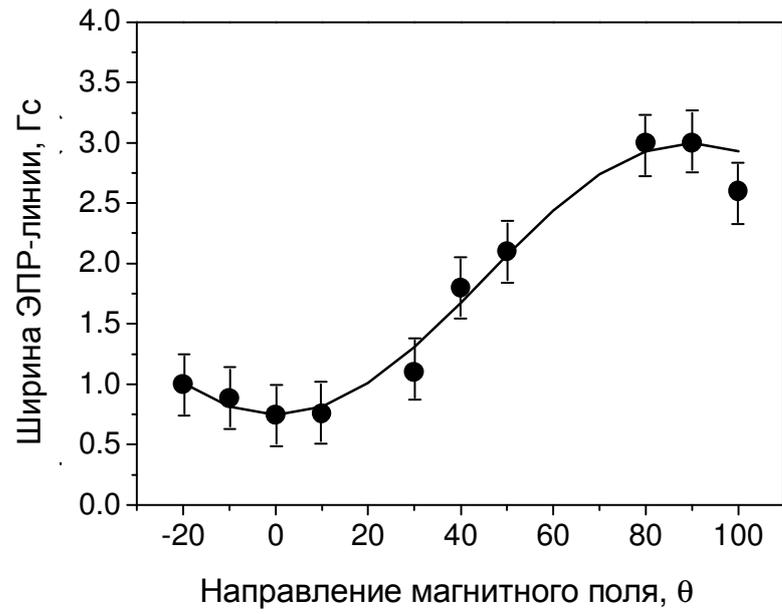


Рис.4.2.5. Зависимость ширины линии от угла между магнитным полем и осью роста структуры [001].

Были проведены исследования поведения ЭПР-сигнала в зависимости от температуры. Для структуры 1-ого типа анизотропный сигнал с $g_{\parallel}=1.9995$ наблюдается в диапазоне температур от 4.5 К вплоть до температуры 7 К. При температуре выше 7 К появляется сигнал от электронов, локализованных на атомах Sb. Для структуры 2-ого типа анизотропный сигнал с $g_{\parallel}=1.9995$ наблюдается вплоть до температуры 9 К. При более высоких температурах анизотропный сигнал исчезает, и появляется изотропный сигнал с $g=2.001$.

4.3. Обсуждение полученных результатов

4.3.1 g-фактор электронов на Ge/Si квантовых точках

В первую очередь приведем доказательства того, что полученный сигнал можно отнести к электронам, локализованным на Ge квантовых точках. Основным аргументом в пользу этого являются анизотропная угловая зависимость и главные значения g-тензора. Дело в том, что для свободных электронов в Si и электронов, локализованных в ненапряжённом Si, характерна изотропная угловая зависимость g-фактора. Только при условии локализации электрона в областях напряжённого Si, может наблюдаться угловая зависимость g- фактора, подобная зафиксированной в наших экспериментах. Упругие деформации, возникающие в Si вблизи вершины квантовой точки, очень близки к одноосному сжатию вдоль оси роста [001]. Эти напряжения приводят к расщеплению Δ -долины в Si, две Δ -долины вдоль [001] опускаются по энергии вниз, формируя потенциальную яму для электронов, а остальные Δ -долины поднимаются вверх. Волновая функция электрона в потенциальной яме вблизи вершины КТ формируется из состояний двух нижних Δ -долин, направленных вдоль [001]. Величины g_{zz} и g_{xx} с высокой точностью совпадают с величинами g_{\parallel} и g_{\perp} в объёмном кремнии, g_{\parallel} - значение g-фактора вдоль главной оси эллипсоида, а g_{\perp} - значение g-фактора в перпендикулярном направлении

(изоэнергетическая поверхность в Δ -долине в Si представляет собой совокупность 6 эквивалентных эллипсоидов). Данное совпадение можно объяснить следующим образом. В магнитном поле $\mathbf{H} \parallel Z$ выделяется направление вдоль главной оси эллипсоида, и регистрируется сигнал с g_{\parallel} , а в магнитном поле $\mathbf{H} \perp Z$ выделяется направление перпендикулярное главной оси эллипсоида, и мы наблюдаем сигнал с g_{\perp} .

Вторым аргументом является отсутствие описанного выше сигнала на структурах без квантовых точек. Третьим аргументом является хорошее соответствие между величиной сигнала, определяемого числом неспаренных электронов в образце, и количеством квантовых точек в образце. Согласно проведенным измерениям количество спинов в исследуемом образце составило $\sim 10^{11}$, что соответствует числу квантовых точек, служащих центрами локализации электронов. Температурная зависимость наблюдаемого ЭПР спектра также служит аргументом в пользу локализации электронов на квантовых точках. В структуре 1-ого типа при понижении температуры от 7 К до 4.5 К электроны переходят с более мелких уровней на атомах Sb на более глубокие уровни на Ge/Si квантовых точках, что проявляется в исчезновении ЭПР-сигнала со сверхтонкой структурой от электронов, локализованных на Sb, и появлении анизотропного ЭПР-сигнала от электронов, локализованных на квантовых точках. В структуре 2-ого типа при повышении температуры электроны делокализуются, уходят с глубоких уровней на квантовых точках, что проявляется в исчезновении анизотропного ЭПР-сигнала от локализованных электронов и появлении изотропного ЭПР-сигнала от свободных электронов.

Интересным экспериментальным результатом является то, что в обоих типах исследуемых структур значение g -фактора практически совпадают, отличие составляет $\Delta g \approx 1 \cdot 10^{-4}$. Основными свойствами, определяющими g -фактор, оказались форма и размер Ge квантовой точки. Согласно данным СТМ форма квантовой точки в обоих случаях близка к «hut»-кластеру, а высота и латеральный размер Ge квантовой точки составляют $h \approx 2$ нм, $l \approx 20$ нм. Отношение h/l определяет значение биаксиальной деформации в гетероструктурах

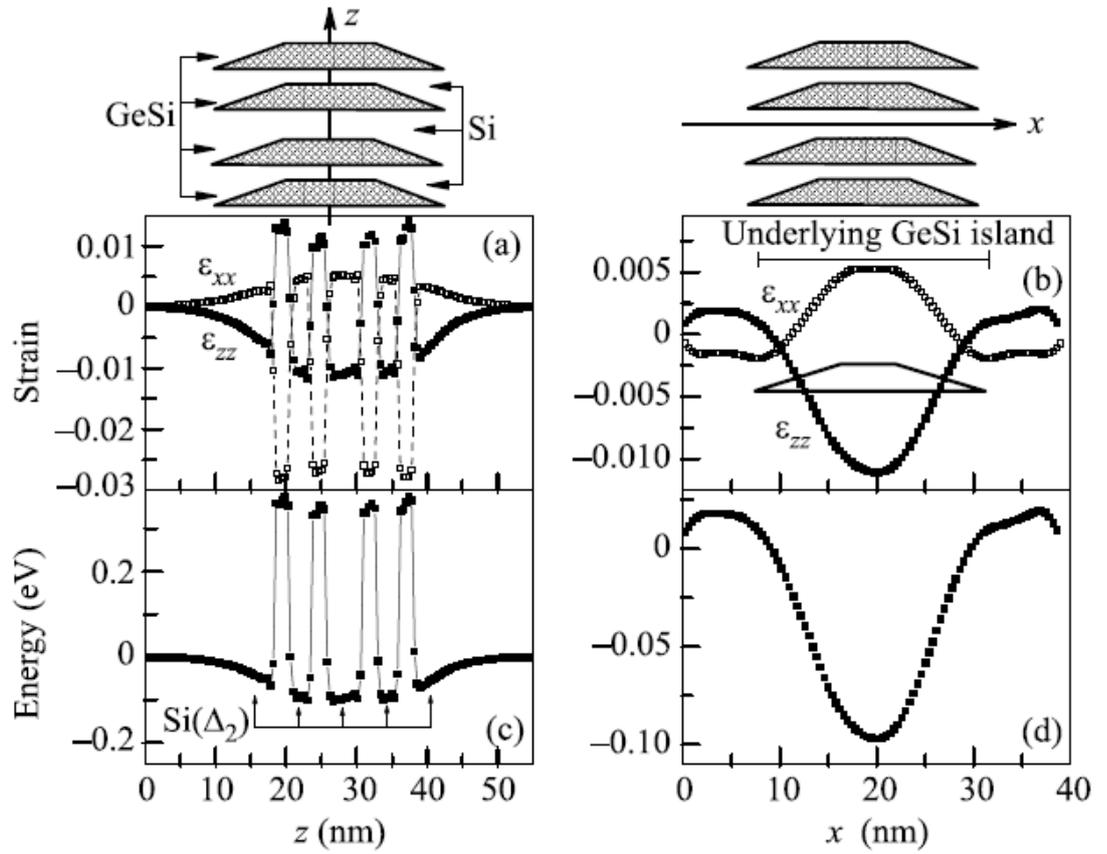


Рис.4.2.5. Профили компонент тензора деформаций и дна зоны проводимости вдоль осей z и x , проходящих через центр симметрии стека, состоящего из 4-х нанокластеров $\text{Ge}_x\text{Si}_{(1-x)}$ ($x=0.7$). Данные взяты из работы [99].

с Ge/Si квантовыми точками. Именно от биаксиальной деформации зависит величина расщепления Δ -долины в Si и величина подмешивания состояний верхних Δ -долин к волновой функции электрона локализованного на Ge квантовой точке. Если биаксиальная деформация мала, то значение g-фактора будет формироваться с учётом состояний верхних Δ -долин, и будет стремиться к g-фактору электрона в объёмном ненапряжённом Si $g=1.9987$, которое сформировано с учётом всех 6 Δ -долин в Si [92]:

$$\frac{1}{3}g_{\parallel} + \frac{2}{3}g_{\perp} = 1.9987.$$

Таким образом, совпадение g-факторов в исследуемых структурах обусловлено совпадением значений биаксиальной деформаций в Si вблизи квантовой точки.

Небольшое отличие $\Delta g \approx 1 \cdot 10^{-4}$ можно связать либо с различием в энергии связи электронов, либо с различием в элементном составе квантовых точек в структурах 1-ого и 2-ого типа.

Согласно расчётам, проведенным в приближении эффективной массы с учётом деформационных эффектов (рис.4.2.5), энергия связи в структуре со стеком составляет ≈ 60 мэВ [100], а в структуре с проводящим каналом, составляет ≈ 70 мэВ (отсчитывается от края зоны проводимости в твёрдом растворе $\text{Ge}_{0.25}\text{Si}_{0.75}$, см. рис. 4.2.6). Во второй структуре ожидалось большее значение энергии связи, но в ходе роста структуры релаксация буферного раствора $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ оказалась недостаточной. Согласно данным исследований методом рентгеновской дифрактометрии степень релаксации буферного раствора во второй структуре составила 58.8%. Разрыв зон на гетерогранице Si/Si_{0.75}Ge_{0.25}, соответствующий такой степени релаксации, составляет около 60 мэВ. Глубина залегания уровня электрона в потенциальной яме, сформированной за счет локальных деформаций в Si вблизи вершины квантовой точки составляет $E_0 \approx 10$ мэВ, отсчёт производится от положения дна зоны проводимости Si на гетерогранице Si/Si_{0.75}Ge_{0.25}. Суммируя оба вклада (разрыв зон + E_0),

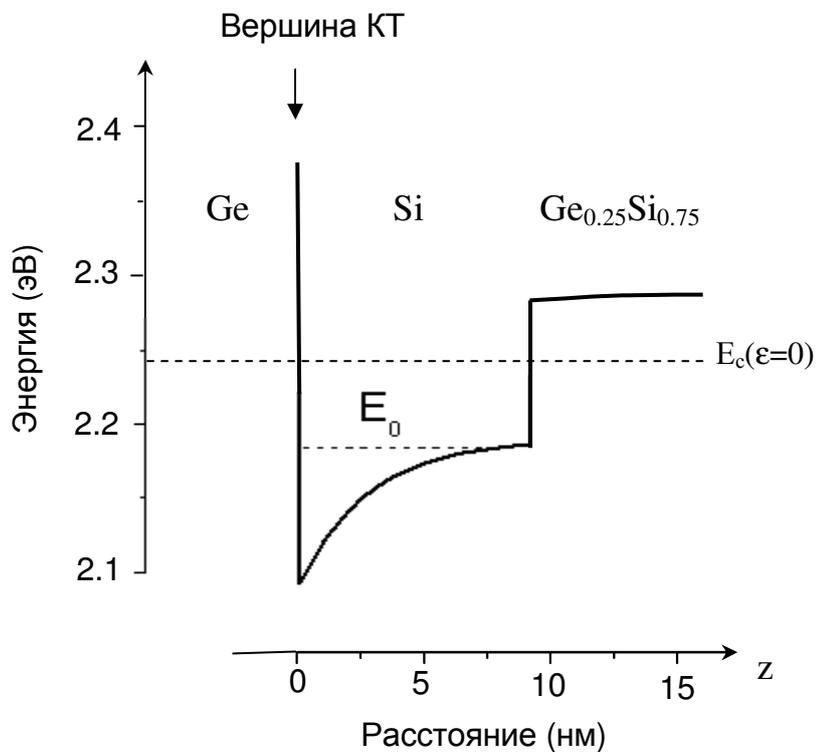


Рис.4.2.6. Профиль дна зоны проводимости вдоль оси Z, проходящей через центр Ge КТ вдоль направления [100], помещенной в середину слоя напряженного кремния, выращенного на релаксированном слое Ge_{0.25}Si_{0.75} (степень релаксации 100%). Штриховыми линиями показаны положение уровня энергии электрона, локализованного вблизи вершины Ge КТ (E₀), и положение дна зоны проводимости в ненапряжённом Si, E_c(ε=0).

получаем в итоге 70 мэВ. Однако, имеет смысл сравнивать величины энергии связи в обеих структурах, отсчитанные от одного уровня энергии: положения дна зоны проводимости в ненапряженном кремнии $E_c(\varepsilon=0)$. В структуре с двумерным Si каналом, выращенным на полностью релаксированном Si/Si_{0.75}Ge_{0.25} слое, положение дна зоны проводимости в напряженном Si находится на 50 мэВ ниже, чем в обычном ненапряженном Si [101]. В нашем случае, при степени релаксации $\approx 60\%$, дно зоны проводимости в Si находится ниже $E_c(\varepsilon=0)$ на ≈ 30 мэВ. Поэтому, если вести отсчёт от $E_c(\varepsilon=0)$, то энергия связи электрона во второй структуре будет составлять около ≈ 40 мэВ (отметим, что уровень Sb в структуре 2-ого типа составляет ≈ 30 мэВ, отсчёт производится от дна зоны проводимости в слое Si_{0.75}Ge_{0.25}, где находится легирующая примесь). Таким образом, различие в энергии связи для первой и второй структурах составляет $\delta E \approx 10-20$ мэВ. Простая оценка показывает, что это различие не может привести к существенному изменению g-фактора. Оценим значение g-фактора из известного соотношения

$$\delta g = g - g_0 = \lambda / \Delta E,$$

где λ - константа спин-орбитальной связи, ΔE – расстояние до ближайшей валентной зоны. В Si $\lambda = 44$ мэВ, $\Delta E = 4.27$ эВ в Δ -точке [78]. Подставив эти значения в приведённое соотношение, можно убедиться, что изменение ΔE на 10-20 мэВ не приводит к значительному изменению g-фактора (изменение g-фактора $\leq 10^{-5}$).

Исходя из этих же соображений, можно показать, что разброс по размерам КТ ($\sim 10-20\%$), который приводит к разбросу по энергиям электронов в ~ 10 мэВ, не может привести к существенному уширению ЭПР-линии, из-за малости спин-орбитального взаимодействия в Si. Однако, известно что для донорных примесей в Si экспериментально зафиксирована зависимость g-фактора электрона от энергии связи. Так разница в энергии связи электронов, локализованных на Sb и As, в 10 мэВ приводит к изменению g-фактора $\Delta g \approx 2.1 \cdot 10^{-4}$. Причина проявления этого эффекта заключается в зависимости константы сверхтонкого

взаимодействия $a \sim \psi^2$ от типа примеси. Связь между g-фактором и a устанавливается соотношением Брейта-Раби [102] и экспериментально зафиксирована в работе [2]. В нашем случае локализация электрона происходит не за счет кулоновского взаимодействия с ионизированной примесью, а благодаря упругим напряжениям в Si вокруг Ge КТ. Отсутствие в области локализации электронов ионизированных доноров приводит к независимости g-фактора электрона от его энергии связи.

Далее обсудим эффект различия КТ по составу на величину g-фактора. Электроны в основном локализованы в Si области вблизи КТ, и только экспоненциально малая часть волновой функции проникает в квантовую точку под Si/Ge барьер. Значение g-фактора зависит от доли волновой функции электрона, проникающей под барьер: $g_{el} = \alpha \cdot g_{Si} + \beta \cdot g_{SiGe}$, где α - часть волновой функции в Si потенциальной яме, а β - часть волновой функции проникающей под Ge (Si/Ge) барьер. Величина спин-орбитального взаимодействия в Ge имеет большую величину, чем в Si, поэтому даже малое проникновение под барьер может привести к существенному изменению g-фактора. Образцы со стеклом и проводящим каналом имеют КТ с различным содержанием Ge: согласно данным Рамановской спектроскопии в образце со стеклом КТ состоит из твердого раствора $Si_{0.3}Ge_{0.7}$, а в образце с проводящим каналом КТ состоит практически из чистого Ge. Поэтому величина барьера в образце со стеклом меньше и степень проникновения волновой функции под барьер должна быть больше. Согласно расчётам величина проникновения электрона в подбарьерную область составляет $\beta_{SiGe} = 0.0025$ (состав $Si_{0.3}Ge_{0.7}$) и $\beta_{Ge} = 0.0005$ (состав Ge). Однако, знание величины проникновения β ещё не позволяет решить задачу о влиянии барьеров на значение g-фактора. Необходимо ещё знать значение g-фактора электрона в подбарьерной области. Оно будет зависеть от того, в какой энергетической долине будет находиться электрон, проникший в подбарьерную область. Электрон, локализованный в Si вблизи Ge КТ, находится в Δ -долине, и часть данного состояния, проникшая под барьер Ge,

с большой вероятностью будет также располагаться в Δ -долине. На сегодняшний день не существует данных о g -факторе электрона в Δ -долине в Ge, поскольку в Ge электроны проводимости находятся в L-долине. Поэтому в **приложении Б** мы провели расчёт g -фактора электрона в Ge в Δ -долине, приняв во внимание не только вклад ближайших валентных зон, но и вклад глубоких 3p-состояний. Полученные значения g -фактора электрона в Δ -долине Ge $g_{\square}^{Ge\Delta} = 2.0412$, $g_{\perp}^{Ge\Delta} = 1.8873$ позволили оценить изменение g -фактора электрона, вызванное различием состава КТ. Для двух типов исследуемых структур расчёт дал изменение g -фактора $\Delta g \approx 1 \cdot 10^{-4}$, что совпадает с экспериментальным результатом.

4.3.2. Угловая зависимость ширины ЭПР-линии

Наиболее узкая линия наблюдается для магнитного поля перпендикулярного плоскости роста структуры. Можно предположить, что для данного направления магнитного поля время спиновой релаксации будет наиболее длительным. Поскольку линия имеет неоднородное уширение, возможна только оценка нижней границы времени спиновой релаксации. Согласно этой оценке для ширины линии 0,8 Гс поперечное время спиновой релаксации составляет $T_2 = 10^{-7}$ с.

Наблюдаемую анизотропию ширины линии можно объяснить наличием эффективного магнитного поля, лежащего в плоскости роста структуры и возникающего вследствие нарушения симметрии квантовой точки. Подобный эффект наблюдался в работе [59] в двумерном электронном газе в асимметричной Si/SiGe квантовой яме и был объяснен первоначально наличием эффективного магнитного поля (эффектом Бычкова-Рашба [27]), лежащим в плоскости квантовой ямы. Впоследствии было выдвинуто объяснение эффекта за счет подавления спиновой релаксации циклотронным движением [103], при этом

существование эффективного магнитного поля в модели было сохранено. Предложенная модель работает в случае двумерных систем с высокой подвижностью, когда основным механизмом спиновой релаксации двумерных электронов является механизм Дьконова-Переля [104]. Спиновая релаксация в данном случае происходит в результате прецессии в эффективном магнитном поле, величина и направление которого зависят от величины и направления квазиимпульса электрона \mathbf{k} , $\mathbf{H}_{BR} = \alpha[\mathbf{k} \times \mathbf{n}]$, где \mathbf{n} – единичный вектор, направленный вдоль оси роста. В случае системы с квантовыми точками эффективное магнитное поле возникает при туннелировании носителей между квантовыми точками (механизм возникновения рассмотрен в главе 3). В процессе туннелирования спин электрона поворачивается на малый угол $\Delta\varphi = \omega_{eff} \cdot t$, что приводит к перевороту спина после достаточного количества прыжков между КТ. Но поскольку прыжки между квантовыми точками носят случайный характер (направление прыжка меняется случайным образом), то при каждом прыжке направление эффективного магнитного поля меняется. Это приводит к тому, что в среднем фаза φ может не меняться, но среднеквадратичное отклонение меняется

со временем по закону $\left(\langle \Delta^2 \varphi \rangle\right)^{1/2} = \omega_{eff} \tau_h \left(\frac{t}{\tau_h}\right)^{1/2}$, где $1/\tau_h$ – частота прыжков между

квантовыми точками. Время дефазировки может быть определено как время, за которое отклонение по фазе за счет флуктуаций достигает 1 рад : $1/t_\phi = \omega_{eff}^2 \tau_h$.

Флуктуирующее магнитное поле может вызвать как релаксацию поперечной компоненты намагниченности, так и релаксацию продольной компоненты. Если принять, что внешнее магнитное поле направлено вдоль оси Z, то для времён продольной и поперечной релаксации можно записать [21]:

$$1/T_1 \sim \overline{H_x^2} + \overline{H_y^2},$$

$$1/T_2 \sim (\overline{H_x^2} + \overline{H_y^2})/2 + \overline{H_z^2},$$

здесь H_x , H_y , H_z – эффективные магнитные поля, вызывающие спиновую релаксацию.

Далее, используя теорию Редфилда [105] и принимая среднее время τ_h как характерное время корреляции флуктуаций τ_c , можно определить времена релаксации для магнитного поля, отклоненного от оси Z на угол θ_H :

$$1/T_1 = \gamma^2 \left(\overline{H_x^2} + \overline{H_y^2 \cos^2 \theta_H} \right) \frac{\tau_c}{1 + \omega_0^2 \tau_c^2},$$

$$1/T_2 = \gamma^2 \overline{H_y^2 \sin^2 \theta_H} \cdot \tau_c + \frac{\gamma^2}{2} \left(\overline{H_x^2} + \overline{H_y^2 \cos^2 \theta_H} \right) \frac{\tau_c}{1 + \omega_0^2 \tau_c^2},$$

где γ -гиромагнитное отношение, ω_0 - ларморовская частота прецессии, θ_H – угол между внешним магнитным полем и осью Z, направлением роста [001].

Время поперечной релаксации T_2 определяет ширину ЭПР-линии в случае однородного уширения. Поскольку в нашем случае ЭПР-линия неоднородно уширена, то можно определить лишь нижнюю границу времени поперечной релаксации. При $\theta_H = 0$, наблюдаемая ЭПР-линия имеет наименьшую ширину $\Delta H \approx 0.8$ Гс, что дает $T_2 \sim 10^{-7}$ с.

Экспериментальная угловая зависимость ширины ЭПР-линии описывается следующей функцией: $\Delta H \sim a_1 \sin^2 \theta_H + a_2 \cos^2 \theta_H$, причем $\frac{a_1}{a_2} = 4$. Сравнивая её с теоретическим

выражением для T_2 можно получить $1 + \omega_0^2 \tau_c^2 = 4$, что дает характерную частоту флуктуаций $1/\tau_c = 3 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Данное значение и время поперечной спиновой релаксации $T_2 = 10^{-7}$ с позволили оценить величину эффективного магнитного поля $H_{eff} \approx 30$ Гс. Полученное значение очень близко к величине поля Бычкова-Рашбы в 2D Si/Ge структурах, что говорит о возможной близости констант Бычкова-Рашбы для 2D структур и для структур с квантовыми точками.

Как правило, в Si неоднородное уширение ЭПР-линии является результатом неоднородностей постоянного магнитного поля, вызванных присутствием изотопов ^{29}Si . Для донорных состояний в Si это приводит к ширине линии $\Delta H \sim 2.5$ Гс, для сравнения ширина

линии в изотопно-чистом Si составляет $\Delta H \sim 0.2$ Гс [2]. Туннелирование между квантовыми точками приводит к усреднению пространственных неоднородностей магнитного поля, вызванных присутствием изотопов и, как следствие, к сужению ЭПР-линий за счёт движения [67]. Однако, этот эффект выражен не столь ярко как для свободных электронов в 2D газе: здесь усреднение неоднородностей поля происходит более эффективно и приводит к очень узким ЭПР-линиям с шириной вплоть до $\Delta H \sim 0.034$ Гс [59]. В случае системы с квантовыми точками усреднение за счёт движения приводит к ширине линии $\Delta H \sim 0.8$ Гс.

Таким образом, полученные результаты позволяют нам предложить следующий механизм потери спиновой ориентации электронов в массиве Ge КТ: спиновая релаксация идёт благодаря взаимодействию с эффективным магнитным полем, лежащим в плоскости массива и связанным с отсутствием зеркальной симметрии квантовых точек относительно плоскости роста и возможностью туннельных переходов между квантовыми точками. Это позволяет предположить, что в массивах с пониженной плотностью квантовых точек, где туннельные переходы будут подавлены, этот механизм спиновой релаксации будет неэффективным, и время спиновой релаксации увеличится. К такому же результату должно привести и создание более симметричных трехмерных потенциальных ям (обладающих зеркальной симметрией относительно плоскости массива КТ).

Выводы по главе 4

В гетероструктурах с Ge/Si квантовыми точками обнаружен новый ЭПР-сигнал с аксиально-симметричным g -фактором ($g_{\parallel}=1.9995$, $g_{\perp}=1.9984$) и анизотропной шириной линии. Ось симметрии совпадает с направлением роста квантовых точек [001]. Минимальное значение ширины линии 0.8 Гс наблюдается при ориентации внешнего магнитного поля вдоль оси роста квантовых точек, а максимальное значение (в 4 раза больше) – в перпендикулярном направлении.

Главные значения аксиально-симметричного g -тензора наблюдаемого ЭПР-сигнала совпадают со значениями g -тензора для электронов в Si в Δ -долине, а сам g -фактор имеет анизотропную угловую зависимость, что позволяет связать этот сигнал с электронами, локализованными в асимметричных потенциальных ямах, образованных за счёт деформаций в Si вблизи вершин Ge КТ.

Экспериментально обнаруженная анизотропия ширины линии ЭПР-сигнала свидетельствует об анизотропии процессов спиновой релаксации в массивах Ge/Si квантовых точек, что служит подтверждением существования эффективного магнитного поля в плоскости массива КТ. Поле возникает при туннелировании электронов между КТ из-за структурной асимметрии потенциальных ям для электронов.

Обнаружено, что g -фактор электрона, локализованного вблизи Ge/Si квантовой точки, в отличие от g -фактора электронов, локализованных на донорах в Si, не зависит от энергии связи электрона (в пределах 10-20 мэВ). Это связано с малостью спин-орбитального взаимодействия в Si и с отсутствием поправки Брейта-Раби, связанной со сверхтонким взаимодействием с ядерными спинами доноров.

На основе анализа угловой зависимости ширины ЭПР-линии проведены оценки величины эффективного магнитного поля, получено значение $H_{eff} \approx 30$ Гс, что является оценкой верхнего предела данной величины.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предсказан механизм спиновой релаксации в плотных массивах туннельно-связанных Ge/Si квантовых точек, обусловленный их структурной асимметрией. Прецессия спина при многократном туннелировании дырок между квантовыми точками в плоскости роста (100) приводит к потере спиновой ориентации.
2. Показано, что в энергетическом спектре одномерного кристалла, узлами которого являются Ge квантовые точки, присутствует спиновое расщепление, связанное с отсутствием у квантовых точек зеркальной симметрии относительно плоскости роста (100). При туннелировании носителей заряда между двумя квантовыми точками это эквивалентно существованию эффективного магнитного поля, аналогичного полю Бычкова-Рашба. Направление данного поля перпендикулярно направлению туннелирования и лежит в плоскости (100).
3. Исследован процесс переворота спина при резонансном туннелировании дырок между двумя Ge квантовыми точками пирамидальной формы. Показано, что вероятность переворота спина при туннелировании зависит от размера и геометрии квантовой точки: при увеличении отношения высоты квантовой точки к размеру её основания вероятность переворота спина возрастает.
4. Установлено, что структурная асимметрия Ge/Si квантовой точки приводит к усилению темпа спиновой релаксации при прыжковом транспорте дырок в двумерных массивах квантовых точек во внешнем магнитном поле. Темп релаксации в массиве квантовых точек, обладающих структурной асимметрией, на 6 порядков превышает темп релаксации в массиве симметричных точек во внешнем магнитном поле ~ 1 Тл.
5. Показано, что в изолированной Ge квантовой точке основным механизмом спиновой релаксации является взаимодействие с фононами. В плотных массивах квантовых точек наряду с фононным механизмом проявляется механизм спиновой релаксации, связанный с

флуктуациями электронного потенциала, определяющий темп спиновой релаксации при температурах $T \leq 4$ К.

6. В гетероструктурах с Ge/Si квантовыми точками обнаружен новый ЭПР-сигнал с аксиально-симметричным g -фактором ($g_{\parallel}=1.9995$, $g_{\perp}=1.9984$) и анизотропной шириной линии. Ось симметрии g -фактора совпадает с направлением роста квантовых точек [100]. Минимальное значение ширины линии 0.8 Гс наблюдается при ориентации внешнего магнитного поля вдоль оси роста квантовых точек, максимальное значение (в 4 раза больше) – в перпендикулярном направлении.

7. Экспериментально обнаруженная анизотропия ширины линии ЭПР-сигнала свидетельствует об анизотропии процессов спиновой релаксации в массивах Ge/Si квантовых точек, что служит экспериментальным подтверждением существования эффективного магнитного поля (аналога поля Бычкова-Рашба) в плоскости двумерного массива квантовых точек. Поле возникает при туннелировании электронов между квантовыми точками из-за структурной асимметрии потенциальных ям для электронов.

8. Обнаружено, что g -фактор электрона, локализованного вблизи Ge/Si квантовой точки, в отличие от g -фактора электронов, локализованных на донорах в Si, не зависит от энергии связи электрона (в пределах 10-20 мэВ). Это связано с малостью спин-орбитального взаимодействия в Si и с отсутствием поправки Брейта-Раби, обусловленной сверхтонким взаимодействием с ядерными спинами доноров.

9. На основе разработанного метода расчёта g -фактора для локализованных состояний определены главные значения g -фактора дырки в основном состоянии в пирамидальной Ge/Si квантовой точке. При типичных размерах Ge квантовой точки $h = 1.5$ нм (высота) $l = 15$ нм (длина стороны основания) главные значения равны $g_{xx}=0.69$, $g_{yy}=1.59$, $g_{zz}=12.28$. Главные оси g -тензора направлены вдоль диагоналей основания пирамиды (направления $[110]$ и $[\bar{1}10]$) и вдоль её оси симметрии (направление $[001]$).

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Спиновая релаксация за счет флуктуаций электронного потенциала

Кроме механизмов спиновой релаксации с участием фононов в плотных массивах Ge квантовых точек существует еще один механизм спиновой релаксации за счёт флуктуаций электронного потенциала. Такие флуктуации могут возникать за счёт быстрых перемещений заряда внутри некоторых пар квантовых точек с сильной туннельной связью (будем называть их флуктуаторами). Как правило, такие пары квантовых точек не принадлежат перколяционному кластеру. При низких температурах, когда проводимость между квантовыми точками не может осуществляться за счёт поглощения (испускания) фононов, именно за счёт флуктуаций электронного потенциала осуществляются переходы между квантовыми точками, обеспечивающие проводимость по массиву квантовых точек.

В отсутствие спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля изменение электрического поля не может оказывать влияние на спиновую степень свободы и приводить к спиновой релаксации. Но если в системе существует спин-орбитальное взаимодействие, то, воздействуя на орбитальную часть волновой функции, можно менять спиновое состояние. На этом основаны предложенные на сегодняшний день схемы управления спином носителя посредством электрического поля [42].

На первом шаге рассмотрим спиновую релаксацию внутри Ge квантовой точки за счёт переходов между зеемановскими уровнями основного состояния. Считаем, что квантовая точка помещена в однородное магнитное поле, направленное вдоль оси симметрии Ge квантовой точки (направление роста). Мы ограничимся простым случаем, когда среднее заполнение КТ в массиве $\nu \approx \frac{1}{2}$, тем самым мы исключаем из рассмотрения эффекты Кулоновской и спиновой блокады.

Запишем гамильтониан взаимодействия с электрическим полем:

$$V = qER,$$

здесь E электрическое поле, источником которого являются флуктуаторы, $q = |e|$ – заряд дырки, R – радиус-вектор рассматриваемой точки, проведенный из точки положения флуктуатора.

В ненулевом магнитном поле, поскольку инвариантность по отношению к обращению времени нарушается, матричный элемент $\langle \uparrow | V | \downarrow \rangle$ отличен от нуля. Вычисление данного матричного элемента сводится к вычислению $\langle \uparrow | R | \downarrow \rangle$. Взяв волновые функции, вычисленные нами в приближении сильной связи в магнитном поле $H=1$ Тл, получаем матричный элемент равный $\langle \uparrow | R | \downarrow \rangle \sim 10^{-2} \text{Å}$.

Согласно золотому правилу Ферми вероятность перехода между $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ определяется:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar^2} \left| \langle \uparrow | R | \downarrow \rangle \right|^2 e^2 \sum_j \langle E_j E_j \rangle_\omega n_j (1 - n_j),$$

здесь ω – частота флуктуаций энергии рассматриваемой дырки, вызываемых кулоновским потенциалом дырок в окружающих квантовых точках, $\langle E_j E_j \rangle_\omega$ – спектральная функция флуктуаторов, $n_j = n(\Delta\varepsilon_j)$ – функция заполнения верхнего уровня флуктуатора, $\Delta\varepsilon_j = \varepsilon_j^{(2)} - \varepsilon_j^{(1)}$ – разница энергий внутри флуктуатора.

$$\langle E_j E_j \rangle_\omega = \frac{1}{\omega} (\delta E(R_j))^2 \frac{\omega \tau_j}{1 + (\omega \tau_j)^2}.$$

Здесь δE – изменение электрического поля в рассматриваемой квантовой точке, вызванное переходом внутри флуктуатора j , τ_j – время релаксации флуктуатора j .

$$(\delta E(R_j))^2 = \left(\frac{e}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{\mathbf{R}_j^{(1)}}{(R_j^{(1)})^3} - \frac{\mathbf{R}_j^{(2)}}{(R_j^{(2)})^3} \right)^2.$$

Время спиновой релаксации в массиве может меняться в экспоненциально широком диапазоне, причем его значение зависит от положения рассматриваемой точки. Каждая

квантовая точка в силу своего положения в массиве имеет свой индивидуальный набор флуктуаторов, которые эффективно могут влиять на спин в данной квантовой точке. В некоторых квантовых точках спиновая релаксация может идти очень интенсивно, а в некоторых спиновая релаксация подавлена. Не все флуктуаторы вносят одинаковый вклад в процесс спиновой релаксации. Это зависит от трех основных факторов.

Первый фактор – это взаимное расположение флуктуаторов и рассматриваемой точки. Этот фактор определяет амплитуду электрического поля в данной точке, будем называть его геометрическим фактором $(\delta E(R_{ij}))^2$.

Второй фактор, $n_j(1-n_j)$, зависит от вероятности перехода внутри флуктуатора. Будем называть его энергетическим фактором. Для перехода внутри флуктуатора необходимо чтобы значения энергий $\varepsilon_j^{(2)}$ $\varepsilon_j^{(1)}$ лежали в узкой полоске Δ_0 вблизи уровня Ферми, уровень $\varepsilon_j^{(1)}$ был заполнен, а $\varepsilon_j^{(2)}$ был пуст, разница энергий $\Delta\varepsilon_j < kT$. При этих условиях два центра (1) и (2), расположенных на близком расстоянии, могут играть роль двухуровневой системы с временем релаксации τ_j .

Третий фактор – это частотный фактор $\omega\tau_j/(1+(\omega\tau_j)^2)$. Частотный фактор отражает вероятность того, что частота флуктуатора $\omega_j \sim 1/\tau_j$ близка к частоте перехода между зеэмановскими уровнями. Время перехода определяется экспоненциальной зависимостью вероятности перехода Γ от расстояния l между точками внутри флуктуатора, $\tau_j \sim \Gamma^{-1} \sim I^{-2}$, где $I \sim \exp(-l/\xi)$ – интеграл перекрытия, ξ – длина локализации.

Сначала оценим время спиновой релаксации за счет электрического поля, создаваемого соседним с рассматриваемой точкой флуктуатором с оптимальным геометрическим фактором $(\delta E(R_{ij}))^2 \sim (e/4\pi\epsilon\epsilon_0 d^2)^2$, где d – среднее расстояние между точками в массиве. Значение оптимального фактора $(\delta E(d))^2 = 1.3 \cdot 10^{11} (\text{В/м})^2$. Если мы

возьмем $\omega_{zeeman} = 10^{12} \text{с}^{-1}$, что соответствует магнитному полю $H=1 \text{Тл}$ и g -фактору дырки $g \sim 10$, и матричный элемент $\langle \uparrow | R | \downarrow \rangle \sim 10^{-2} \text{А}$, то получим темп релаксации $\Gamma = 2 \cdot 10^6 \text{с}^{-1}$.

Если мы учтем два остальных фактора, энергетический и частотный, то темп релаксации снизится. Для оптимального флуктуатора, обеспечивающего максимальный темп релаксации, значения частотного и энергетического факторов равны $n(n-1) = 1/4$ и $\omega\tau_j / (1 + (\omega\tau_j)^2) = 1/2$. Отсюда темп релаксации $\Gamma = 2.5 \cdot 10^5 \text{с}^{-1}$.

Чтобы получить среднее время спиновой релаксации в реальных массивах Ge квантовых точек, необходимо знать пространственное распределение флуктуаторов для каждой квантовой точки, их частотные характеристики, вычислить на основе этого время спиновой релаксации для каждой точки, а затем усреднить эти значения. Если проводить простое усреднение, то получится неверное значение времени спиновой релаксации, поскольку оно будет определяться самыми длинными временами во всем массиве. Поэтому мы обратились к численному моделированию спиновой релаксации в типичном массиве Ge квантовых точек. Для моделирования случайного расположения квантовых точек в двумерном массиве КТ, мы применили решение задачи случайного расположения в модели бильярда. Мы позволили квантовым точкам занимать случайные позиции в плоскости xu , как бильярдным шарам, с единственным ограничением на расстояние между точками $d \geq 0.7 \cdot \langle d_{QD} \rangle$, где $\langle d_{QD} \rangle$ – среднее расстояние между Ge квантовыми точками. Для типичного массива Ge квантовых точек с плотностью КТ $N_{QD} \approx 3 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$, среднее расстояние $\langle d_{QD} \rangle = 1 / \sqrt{N_{QD}} \approx 18 \text{нм}$. Таким способом мы получали различные реализации массивов квантовых точек (см. рис.А.1). В каждой реализации мы находили набор достаточно хороших флуктуаторов и вычисляли время спиновой релаксации в случайно выбранной квантовой точке. Накопив таким образом статистику, мы построили гистограмму, которая показывает наиболее вероятное время спиновой релаксации в

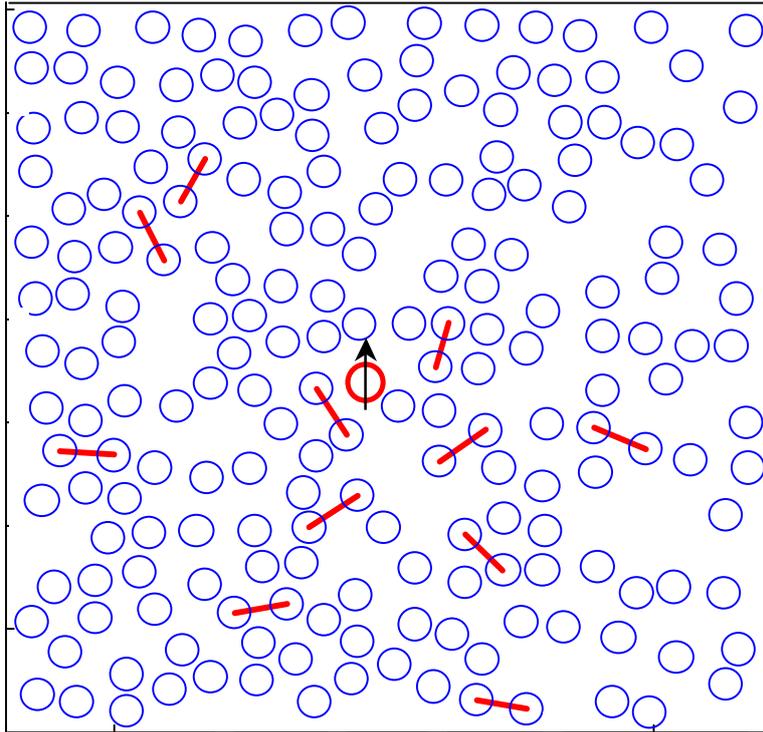


Рис.А.1. Один из примеров реализаций случайного распределения квантовых точек в двумерном массиве КТ. В рассматриваемой точке схематически показано направление спина. Пары точек, образующие эффективные флуктуаторы, показаны отрезками, соединяющими данные точки.

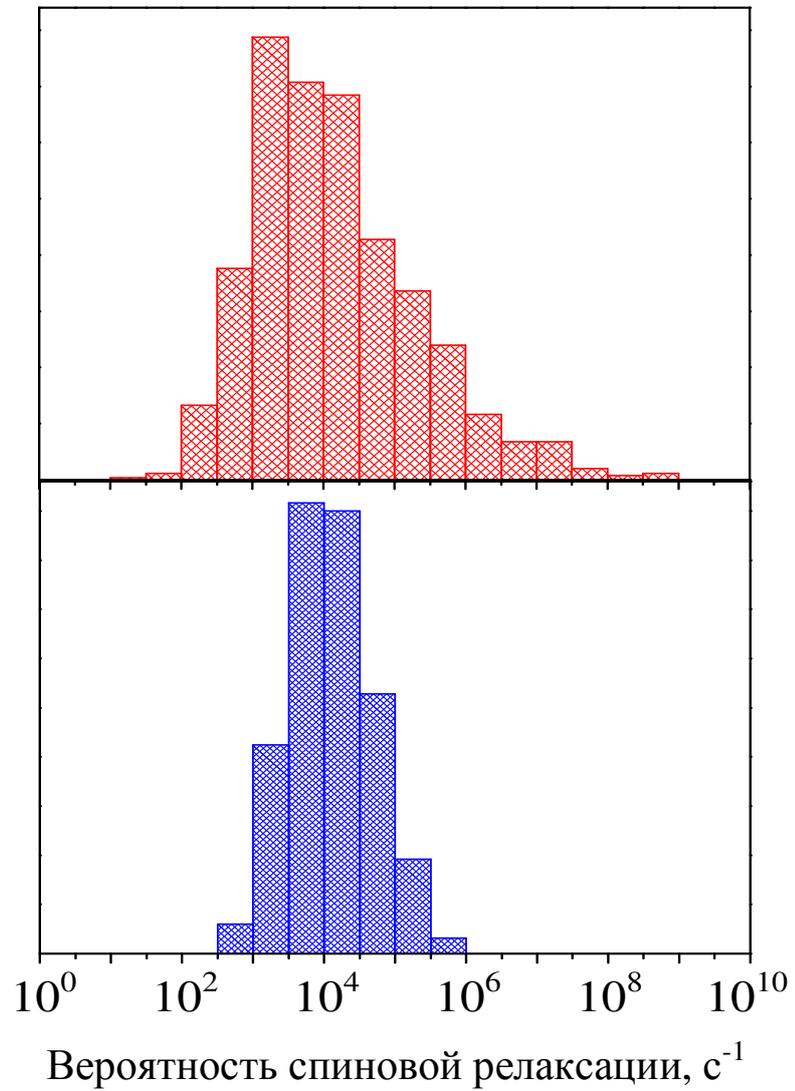


Рис.А.2. Распределение вероятности спиновой релаксации за счёт флуктуаций электронного потенциала в массиве Ge квантовых точек, (а) – с однородным распределением квантовых точек в плоскости массива, (б) – со случайным распределением квантовых точек, на основе модели бильярда

типичном массиве Ge КТ. На рисунке А.2 видно, что типичная скорость спиновой релаксации $\Gamma \sim 10^4 \text{ с}^{-1}$. Вычисления проводились для $kT / \Delta \varepsilon \sim 0.1$. Увеличение магнитного поля до $H=10 \text{ Тл}$ приводит к увеличению темпа спиновой релаксации на порядок. Причиной этого является увеличение матричного элемента $\langle \uparrow | R | \downarrow \rangle \sim 0.1 \text{ \AA}$ (квадратичная зависимость от магнитного поля). Поскольку $\Gamma \sim 1/\omega_z$, то в результате получается линейная зависимость от магнитного поля.

Теперь рассмотрим переворот спина за счёт флуктуации при туннелировании между квантовыми точками. В этом случае формализм остается таким же, только матричный элемент $\langle \uparrow | R | \downarrow \rangle$ между спиновыми состояниями в одной точке заменяется на матричный элемент между спиновыми состояниями в разных точках $\langle \uparrow, i | R | \downarrow, i+1 \rangle$, здесь туннелирование идет из точки i в точку $(i+1)$. Благодаря существованию особой формы спин-орбитального взаимодействия и связанного с ним эффективного магнитного поля данный матричный элемент не равен 0 даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Как мы уже писали выше, эффективное магнитное поле приводит к подмешиванию состояния с противоположным спином в соседней туннельно-связанной квантовой точки.

$$\Psi_i^\uparrow = \psi_i^\uparrow + \frac{I_{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \psi_{i+1}^\downarrow, \quad \Psi_{i+1}^\downarrow = \psi_{i+1}^\downarrow - \frac{I_{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \psi_i^\uparrow.$$

здесь $I_{\uparrow\downarrow}$ – интеграл перекрытия между разными спиновыми состояниями в соседних точках,

Δ – разница энергий между состояниями в точках i и $(i+1)$.

При типичных параметрах $I_{\uparrow\downarrow} \approx 10^{-6} \text{ эВ}$, $\Delta \approx 10^{-3} \text{ эВ}$ и $d_{QD} \approx 10 \text{ нм}$ квадрат матричного

элемента $\langle \Psi_n^\uparrow | \rho | \Psi_m^\downarrow \rangle^2 \sim \frac{(I_{\uparrow\downarrow})^2}{\Delta^2} \cdot d_{QD}^2 \sim 10^{-2} \text{ \AA}^2$. Это приводит к темпу спиновой релаксации на

два порядка больше, чем темп релаксации внутри квантовой точки. Отметим, что здесь мы пренебрегли отличием ω_z и Δ , считая их величинами одного порядка.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б.

g-фактор электрона, локализованного вблизи вершины Ge/Si квантовой точки

В данном приложении рассмотрены поправки к g-фактору электрона, локализованного вблизи вершины Ge/Si квантовой точки, за счёт эффекта квантования и проникновения волновой функции электрона в подбарьерную область.

При понижении размерности объекта, в котором локализован электрон, возможна дополнительная перенормировка g-фактора электрона. Причину этого можно понять, если обратиться к упрощенной формуле g-фактора: $|g - g_0| \sim \sum_i \frac{\Delta_i^{SO}}{E - E_i}$, где учитывается вклад

всех зон по теории возмущения, здесь Δ_i^{SO} - спин-орбитальное расщепление i -ой зоны, $(E - E_i)$ - энергетический зазор между зоной проводимости и i -ой зоной. Обычно самый

большой вклад вносит ближайшая валентная зона, тогда формула модифицируется до

$|g - g_0| \sim \frac{\Delta_{so}}{E_C - E_V}$, так называемое двухзонное приближение, здесь $E_C - E_V$ - расстояние от

зоны проводимости в той долине, где находится электрон до валентной зоны при том же значении квазиимпульса k , Δ_{so} - спин-орбитальное расщепление валентной зоны.

Формирование квантовой ямы для электрона приводит к тому, что уровень квантования электрона, как правило, лежит существенно ниже дна зоны проводимости. Соответственно меняется эффективный энергетический зазор между зоной проводимости и валентной зоной,

и формула приобретает вид $|g - g_0| \sim \frac{\Delta_{so}}{E_C - E_Q - E_V}$, где E_Q - глубина залегания уровня в

квантовой яме. То есть изменение g-фактора определяется эффективным изменением ширины запрещенной зоны для рассматриваемого электрона. В первую очередь необходимо рассмотреть этот механизм перенормировки g-фактора.

В случае электрона, локализованного вблизи Ge квантовой точки, квантовая яма формируется за счёт деформационных полей, возникающих из-за рассогласования

постоянных решеток Ge и Si. Наибольшие деформации возникают вблизи вершины пирамиды, представляющей Ge квантовую точку и под её основанием. То есть для электронов формируются две квантовые ямы приблизительно одинаковой глубины, вблизи вершины квантовой точки и под её основанием. Несмотря на достаточную глубину квантовых ям $U \sim 160$ мэВ, глубина залегания уровней оказывается небольшой $E \sim 10$ мэВ [98], из-за малой эффективной ширины квантовых ям ($d \sim 2-3$ нм). По сравнению с расстоянием $E_c - E_v$ в Δ -долине кремния $E_g = 4.27$ эВ [78] эта величина ничтожно мала, и не может привести к существенной перенормировке g -фактора. Если учесть что константа спин-орбитального взаимодействия в кремнии составляет всего 44 мэВ [78], то становится понятным, что перенормировка g -фактора за счет эффекта квантования не эффективна.

Существует дополнительная возможность изменения g -фактора электрона, локализованного в квантовой яме. Если квантовая яма образована на основе гетеропереходов, то есть она сформирована за счет разрывов зон материалов, образующих гетеропару, то возможен механизм изменения g -фактора за счёт проникновения волновой функции электрона в материал, формирующий стенки квантовой ямы. Поскольку одна из стенок квантовой ямы для электрона в нашем случае сформирована гетеропереходом Ge/Si, то модификация g -фактора может произойти за счет проникновения волновой функции электрона в область Ge. Волновая функция электрона, локализованного в квантовой яме вблизи Ge квантовой точки, практически полностью находится в Si, и только малая часть её проникает в область Ge. Однако эта малая часть может сильно повлиять на значение g -фактора электрона, поскольку в Ge спин-орбитальное взаимодействие достаточно велико и составляет $E_{SO} = 0.29$ эВ [78]. Поэтому для точного определения значения g -фактора необходимо определить, какая часть волновой функции электрона находится в Ge квантовой точке. Второй проблемой, требующей решения, является то, что электрон, локализованный в Si, находится в Δ -долине, и часть данного состояния, находящаяся в Ge, с большой вероятностью будет также располагаться в Δ -долине. На сегодняшний день не существует

данных о g -факторе электрона в Δ -долине в Ge. Поэтому стоит отдельная задача определения значения g -фактора электрона в Δ -долине в Ge.

В первую очередь, займемся вычислением доли волновой функции электрона в Ge квантовой точке. Поскольку g -фактор в Ge в L-долине составляет $g = 1.5$, а в Γ точке $g = 3$, и расстояние до ближайшей (валентной) зоны в Δ -долине больше, чем в перечисленных двух первых, то можно ожидать что поправка к g -фактору в Δ -долине не будет превышать поправку к g -фактору в L и Γ точках.

Для расчёта волновой функции электрона в квантовой яме вблизи Ge квантовой точки удобно использовать метод эффективной массы. Применение метода эффективной массы для электронов оправдано тем, что они не «замкнуты» в пределах кластера Ge, и поэтому характерные размеры области локализации электронов велики по сравнению с постоянной решётки. Потенциальную энергию электрона в напряжённой гетероструктуре, $U_e(\mathbf{r})$, можно представить как сумму потенциальной энергии без учёта деформации $U_{e0}(\mathbf{r})$ и потенциала $U_{e1}(\mathbf{r})$, связанного с упругой деформацией. В структуре, состоящей из областей кремния и германия, величина U_{e0} выражается в виде

$$U_{e0}(\mathbf{r}) = E_c^{Ge} \cdot x(\mathbf{r}) + E_c^{Si} \cdot (1 - x(\mathbf{r})), \quad (\text{Б.1})$$

где $x(\mathbf{r}) = 1$, если радиус-вектор \mathbf{r} указывает на точку внутри области Ge; иначе $x(\mathbf{r}) = 0$. В качестве начала отсчёта энергии примем край зоны проводимости недеформированного кремния; тогда $E_c^{Si} = 0$, а величина E_c^{Ge} равна разрыву зон проводимости между недеформированными Ge и Si.

Деформационная поправка U_{e1} оказывается различной для разных минимумов зоны проводимости. В кремнии вблизи края зоны проводимости имеются шесть Δ -минимумов. Обозначим их символами Δ^{100} , $\Delta^{\bar{1}00}$, Δ^{010} , $\Delta^{0\bar{1}0}$, Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$, в которых верхний индекс

указывает направление от центра зоны Бриллюэна к данному минимуму. Тогда U_{e1} имеет следующий вид [66]:

$$\text{для } \Delta^{100} \text{ и } \Delta^{\bar{1}00}: \quad U_{e1}(\mathbf{r}) = \bar{\Xi}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \bar{\Xi}_u \cdot \varepsilon_{xx}(\mathbf{r}),$$

$$\text{для } \Delta^{010} \text{ и } \Delta^{0\bar{1}0}: \quad U_{e1}(\mathbf{r}) = \bar{\Xi}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \bar{\Xi}_u \cdot \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}),$$

$$\text{для } \Delta^{001} \text{ и } \Delta^{00\bar{1}}: \quad U_{e1}(\mathbf{r}) = \bar{\Xi}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \bar{\Xi}_u \cdot \varepsilon_{zz}(\mathbf{r}).$$

Здесь $\bar{\Xi}_d$ и $\bar{\Xi}_u$ — константы деформационного потенциала, $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ — тензор деформации в точке \mathbf{r} ; $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{xx}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{yy}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{zz}(\mathbf{r})$ — след тензора деформации.

Согласно приведённым выше соображениям, достаточно включить в рассмотрение только два из шести Δ -минимумов в Si: Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$. В германии самым низшим минимумом зоны проводимости является L -долина. Однако переход электрона из Δ -долины кремния в L -долину германия подавлен из-за того, что при таком переходе электрон должен рассеять значительный импульс на границе Si-Ge⁶. Поэтому мы считаем, что электрон, будучи сосредоточен главным образом в кремнии в Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$ -минимумах, принадлежит тем же Δ -минимумам и внутри Ge кластера.

В результате получим следующее выражение для потенциальной энергии электрона:

$$U_e(\mathbf{r}) = E_c^{Ge} \cdot x(\mathbf{r}) + E_c^{Si} \cdot (1 - x(\mathbf{r})) + \bar{\Xi}_d \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) + \bar{\Xi}_u \cdot \varepsilon_{zz}(\mathbf{r}). \quad (\text{Б.2})$$

Здесь величина E_c^{Ge} , как и E_c^{Si} , относится к Δ -долине.

Деформационные потенциалы в Si и в Ge можно взять из работ Van de Walle [66]. Для кремния они составляют $\bar{\Xi}_d = 1.28$ эВ, $\bar{\Xi}_u = 8.7$ эВ. Для германия $\bar{\Xi}_u = 9.42$ эВ, а $\bar{\Xi}_d$ можно определить, пользуясь выражением $(\bar{\Xi}_d + \frac{1}{3}\bar{\Xi}_u - a_v) = 1.31$ и взяв $a_v = 1.24$. В результате получаем $\bar{\Xi}_d = -0.59$. Сразу следует отметить, что деформпотенциалы в работе [66] определены довольно приближенно, так, например, для кремния экспериментально

⁶ Вероятность междолинного перехода на гетерогранице исследовалась теоретически в работах [106,107] для структур GaAs/AlGaAs. См. также работу [108].

определенное значение $\Xi_u = 8.7$ эВ, а рассчитанное значение составляет $\Xi_u = 9.16$ эВ. Мы взяли для своих расчетов экспериментальное значение, как более достоверное. А вот в случае германия экспериментальное значение отсутствует, поэтому приходится довольствоваться расчётным значением $\Xi_u = 9.42$ эВ. Следовательно, ошибка определения потенциала для электрона может составить порядка ~ 0.01 эВ (см. выражение (Б.2)).

Для вычисления потенциальной энергии электронов ($U_e(\mathbf{r})$) мы использовали распределение упругой деформации $\varepsilon_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ в структуре Ge/Si вычисленное в рамках модели Китинга [109] с помощью метода, изложенного в работе [65].

Кинетическая энергия электрона в Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$ -долинах выражается в виде дифференциального оператора

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{xy}^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (\text{Б.3})$$

Величины m_z^* и m_{xy}^* представляют собой продольную и поперечную эффективные массы электрона. Согласно справочным данным [78], мы принимаем следующие значения: для кремния $m_z^* = 0.92 \cdot m_0$, $m_{xy}^* = 0.19 \cdot m_0$; для германия $m_z^* = 1.35 \cdot m_0$, $m_{xy}^* = 0.29 \cdot m_0$, m_0 — масса свободного электрона.

Численное решение системы уравнений Шрёдингера осуществлялось с помощью метода конечных разностей. Для этого была выбрана кубическая сетка с шагом, равным постоянной решётки кремния (0.54 нм)⁷.

Действие оператора кинетической энергии \hat{T} вида (2) на волновую функцию ψ , представленную на сетке, задавалось с помощью следующей разностной схемы:

$$(\hat{T}\psi)_{i,j,k} = \frac{\hbar^2}{2m_{xy}^* a^2} (4\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k} - \psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j-1,k} - \psi_{i,j+1,k}) +$$

⁷ Вводить более мелкую сетку было бы превышением точности метода эффективной массы, так как огибающая волновая функция не имеет смысла на масштабах, меньших, чем постоянная решётки.

$$+ \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} (2\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1} - \psi_{i,j,k+1}),$$

где целочисленные индексы i, j, k соответствуют координатам x, y, z узла; a — шаг сетки. Матричные элементы $T_{ijk,(i-1)jk}$ описывают связь между узлами сетки ijk и $(i-1)jk$ задаваемую разностной схемой и равны $-\frac{\hbar^2}{2m^*a^2}$. Если проводить аналогию с методом сильной связи эти матричные элементы по сути имеют смысл эффективных интегралов перекрытия между соседними узлами. Видно, что значение элемента зависит от свойств материала, которому принадлежат узлы $i, (i-1)$, точнее от эффективной массы в этом материале. Если оба узла принадлежат кремнию, то мы подставляем $m^* = m_{Si}^*$, если германию, то $m^* = m_{Ge}^*$. Если же узел i принадлежит германию, а узел $(i-1)$ принадлежит кремнию, то подставляем среднее $m^{-1} = (m_{Ge}^{-1} + m_{Si}^{-1})/2$. Таким образом, мы учитываем различие масс на гетерогранице. Такая процедура аналогична граничным условиям Бастарда

$$\psi|_A = \psi|_B, \quad \frac{1}{m_A} \frac{d\psi}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m_B} \frac{d\psi}{dz} \Big|_B.$$

Уравнение Шрёдингера решалось посредством итерирования с помощью релаксационного метода, описанного в § 7.4 книги [74]. Выполнение итераций прекращалось, когда изменение энергии на последней итерации составляло менее 0.1 мэВ.

Размеры сетки составляли $50 \times 50 \times 60$ узлов, или приблизительно $27 \times 27 \times 32$ нм.

Согласно проведенным расчетам в приближении эффективной массы вероятность нахождения электрона в Ge составляет $P(\text{Ge}) \sim 0.0005$, то есть меньше процента. Таким образом, поправка к g -фактору электрона локализованного вблизи Ge квантовой точки будет несущественной, отличие от g -фактора свободного электрона будет невозможно зафиксировать экспериментально, даже если g -фактор в Δ -долине будет ~ 10 .

Далее следует отметить, что обоснованность применения метода эффективной массы для вычисления доли волновой функции электрона в области Ge вызывает большие

сомнения. Метод эффективной массы может быть обоснованно применен, если характерный размер области локализации электронов велик по сравнению с постоянной решётки. Для расчёта волновой функции электрона в Si этот метод применим, а вот вычисление доли волновой функции электрона, находящейся в Ge требует более точного подхода.

Можно продемонстрировать это на основе простых оценок. Рассмотрим более простой одномерный случай. Разностная схема запишется следующим образом:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*a^2}(2\psi_i - \psi_{i-1} - \psi_{i+1}) + U\psi_i = E\psi_i,$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^*a^2}(2\psi_i - \psi_{i-1} - \psi_{i+1}) + U\psi_i \approx 0,01 \cdot \psi_i,$$

Энергия основного состояния электрона $E \approx 10$ мэВ, поэтому для оценки этим можно пренебречь по сравнению с $U \approx 0.6$ эВ. Волновая функция в области Ge экспоненциально затухает. Пусть на одном шаге разностной схемы волновая функция затухает в $\lambda = e^\alpha$ раз, тогда

$$\frac{\hbar^2}{2m^*a^2}(2 - \lambda - \lambda^{-1}) = -U, \text{ где } \lambda = e^\alpha$$

$$(\lambda + \lambda^{-1} - 2) = \frac{\hbar^2 U}{2m^*a^2},$$

$$\text{ch } \alpha - 1 = 1.77$$

$$\alpha = 1.68, \lambda = 5.4.$$

То есть волновая функция затухает на одном шаге решетки в 5 раз, что свидетельствует о том, что метод эффективной массы может дать лишь грубую оценку сверху для доли волновой функции электрона, находящейся в Ge.

Рассмотрим близкую ситуацию проникновения волновой функции в подбарьерную область в одномерном случае. Высоту барьера примем приблизительно равной высоте нашего барьера $U \approx 0.6$ эВ. Расположим гетерограницу Si/Ge при $x=0$. Область локализации

электрона в области кремния $l \approx 3$ нм. Предположим для оценки, что волновая функция в этой области имеет вид: $\psi = C \sin \frac{\pi}{l} x$. Из условия нормировки можно найти константу C .

$$\int_0^l \psi^2 dx = 1$$

$$C^2 \int_0^l \sin^2 \left(\frac{\pi}{l} x \right) dx = 1 \Rightarrow C = \sqrt{\frac{2}{l}}.$$

Волновая функция в подбарьерной области ($x < 0$) имеет вид $\psi = \psi(0) \exp \kappa x$.

$\psi(0)$ можно найти из условия $\frac{\psi'(0)}{\psi(0)} = \kappa$.

$$\psi'(x) = C \frac{\pi}{l} \cos \frac{\pi}{l} x, \quad \psi'(0) = C \frac{\pi}{l} = \sqrt{\frac{2}{l}} \frac{\pi}{l}$$

Доля волновой функции под барьером равна:

$$\alpha = \int_{-\infty}^0 \psi^2(x) dx = \int_{-\infty}^0 \psi^2(0) \exp^2(\kappa x) dx = \left(\frac{\psi'(0)}{\kappa} \right)^2 \int_{-\infty}^0 \exp^2(\kappa x) dx = \frac{[\psi'(0)]^2}{2\kappa^3} = \pi^2 \left(\frac{\hbar^2}{2mUd^2} \right)^{3/2}$$

$$\alpha = 0.0067.$$

Такая оценка даёт представление о порядке ожидаемой величины. Уменьшение величины проникновения в Ge, которое дало решение трёхмерной задачи связано с особенностями трехмерного потенциала, который имеет пирамидальная квантовая точка. Волновая функция электрона как бы «обтекает» вершину пирамиды, практически не проникая в Ge.

В следующем параграфе дано вычисление g -фактора электрона в Δ -долине в Ge. В рамках подхода, развитого Liu [110], мы провели расчёт g -фактора электрона в Ge в Δ -долине, приняв во внимание не только вклад ближайших валентных зон, но и вклад глубоких $3p$ -состояний. Согласно нашим вычислениям g -фактор в Δ -долине Ge равен:

$$g_{\square}^{Ge} = g_0 + \delta g_{\square}^{Ge} = 2.0023 + 0.0389 = 2.0412,$$

$$g_{\perp}^{Ge} = g_0 + \delta g_{\perp}^{Ge} = 2.0023 - 0.115 = 1.8873.$$

Теперь окончательно ясно, что g -фактор электрона в квантовой яме вблизи Ge квантовой точке практически не должен отличаться от g -фактора свободного электрона в Si.

g -фактор электронов в Δ долине в Ge

Для таких полупроводников как кремний и германий, значение спин-орбитального расщепления много меньше величины запрещенной зоны. В этом случае спин-орбитальное взаимодействие [92]

$$H_{s-o} = \frac{\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \equiv \vec{h} \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{Б.4})$$

можно рассмотреть как возмущение .

Тогда для g -фактора можно записать [92]:

$$\mathbf{g} = 2 \cdot \mathbf{1} + \frac{2}{2mi} \sum_{\mu\nu} \{ \mathbf{h}_{0\mu} \mathbf{p}_{\mu\nu} \times \mathbf{p}_{\nu 0} + \mathbf{h}_{\mu\nu} \mathbf{p}_{0\mu} \times \mathbf{p}_{\nu 0} + \mathbf{h}_{\nu 0} \mathbf{p}_{0\mu} \times \mathbf{p}_{\mu\nu} \} \quad (\text{Б.5})$$

В статье [92] Roth были получены следующие формулы для изменения g -фактора электронов проводимости в кремнии в Δ -долине:

$$\begin{aligned} \delta g_{\parallel} = \delta g_x = \text{Re} \frac{4}{mi} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{E_{0\mu} E_{0\nu}} \langle \Delta_1 | p_y | \Delta_5^{\mu y} \rangle \times \langle \Delta_5^{\mu y} | h_x | \Delta_5^{vz} \rangle \times \langle \Delta_5^{vz} | p_z | \Delta_1 \rangle + \\ \text{Re} \frac{8}{mi} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{E_{0\mu} E_{0\nu}} \langle \Delta_1 | h_x | \Delta_1^{\mu} \rangle \times \langle \Delta_1^{\mu} | p_y | \Delta_5^{vz} \rangle \times \langle \Delta_5^{vz} | p_z | \Delta_1 \rangle ; \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

$$\begin{aligned} \delta g_{\perp} = \text{Re} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{E_{0\mu} E_{0\nu}} \langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{\mu z} \rangle \times \langle \Delta_5^{\mu z} | h_y | \Delta_1^v \rangle \times \langle \Delta_1^v | p_x | \Delta_1 \rangle + \\ \text{Re} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{E_{0\mu} E_{0\nu}} \langle \Delta_1 | h_y | \Delta_5^{\mu z} \rangle \times \langle \Delta_5^{\mu z} | p_z | \Delta_1^v \rangle \times \langle \Delta_1^v | p_x | \Delta_1 \rangle + \\ \text{Re} \sum_{\mu\nu} \frac{1}{E_{0\mu} E_{0\nu}} \langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{\mu z} \rangle \times \langle \Delta_5^{\mu z} | p_x | \Delta_5^{vz} \rangle \times \langle \Delta_5^{vz} | h_y | \Delta_1 \rangle . \end{aligned} \quad (\text{Б.7})$$

Выражения содержат матричные элементы импульса \mathbf{p} и матричные элементы \mathbf{h} . Матричные элементы импульса \mathbf{p} содержатся в выражении для эффективной массы, а

матричные элементы \mathbf{h} задействованы в формулах для вычисления спин-орбитального расщепления.

Для Ge (L-долина) применение двухзонного приближения (когда в суммировании учитывается только ближайшая зона) дает хорошее совпадение с экспериментальными результатами [3]. Для кремния (Δ долина) применение двухзонного приближения не дает результатов, согласующихся с экспериментальными. Поскольку строение зон в Δ долине Ge и Si носит общий характер, то данный вывод можно сделать и для случая Δ долины в Ge. То есть для правильной оценки g -фактора для состояний Δ -долины нужно учитывать при суммировании вклады и других зон, что и было сделано для Si в работе [110]. Следуя этой работе, сделаем оценку вкладов различных зон. Согласно формулам (Б.6) и (Б.7), вклад i -ой зоны можно оценить отношением $r_i = \frac{\Delta_i^{SO}}{E - E_i}$, где Δ_i^{SO} - спин-орбитальное расщепление i -ой зоны, а $E - E_i$ - расстояние от нее до Δ_1 , которая играет роль дна зоны проводимости в кремнии.

В кремнии для $2p$ состояния энергия спин-орбитального расщепления составляет $\Delta_i^{SO} = 0.74$ эВ, $r_{2p} = \frac{0.74 \text{ эВ}}{100 \text{ эВ}} = 7 \times 10^{-3}$. Для зоны Δ_5 $r_{\Delta_5} = \frac{10^{-3} \text{ эВ}}{4.27 \text{ эВ}} = 2 \times 10^{-4}$. Видно, что $r_{2p} \gg r_{\Delta_5}$. Вклады остальных зон (Δ_2 и Δ_1 , см. рис.Б.1) малы по сравнению с вкладом зоны Δ_5 . Это соотношение показывает, что вклад глубокого состояния $2p$ в g -фактор кремния является наибольшим. В германии вклад $3p$ состояния оказывается основным. Это следует из сравнения вкладов $r_i = \frac{\Delta_i^{SO}}{E - E_i}$ от $3p$ состояний германия $r_{2p} = \frac{4.1 \text{ эВ}}{120 \text{ эВ}} \approx 0.03$ и от состояний Δ_5 долины $r_{\Delta} = \frac{0.006 \text{ эВ}}{4.37 \text{ эВ}} \approx 0.001$.

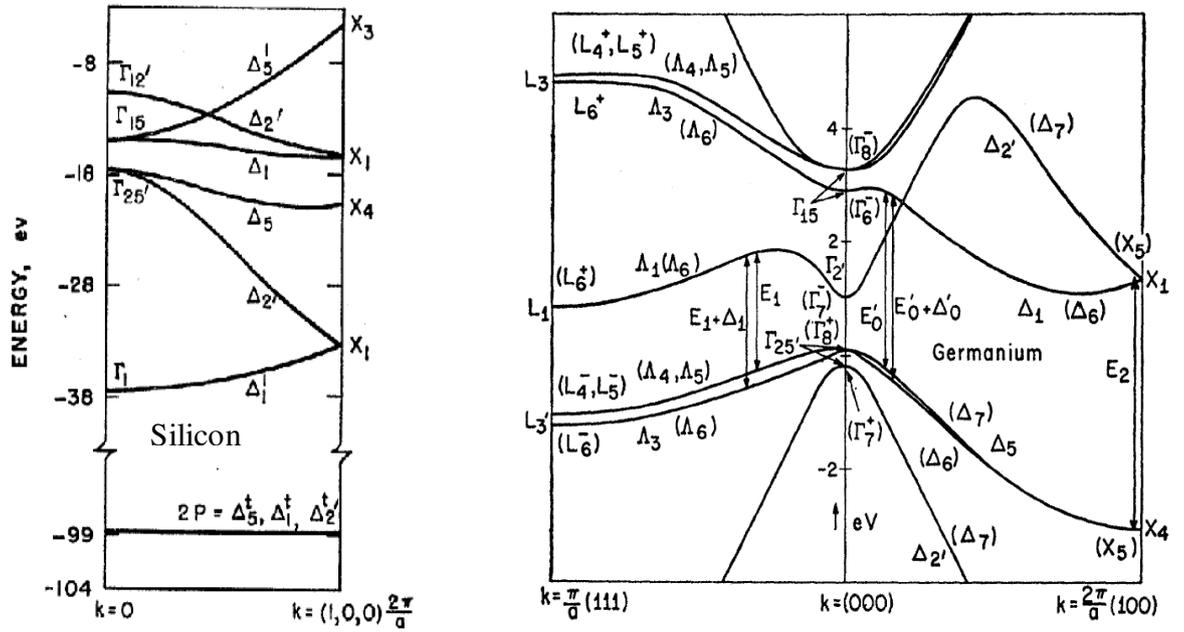


Рис. Б.1. Зонные структуры германия [111] и кремния [112].

В Таблице Б.1 приведены матричные элементы, используемые при вычислении g -фактора электрона в Δ -долине в Si (данные взяты из работы [110]). Можно увидеть, что наибольший вклад в g -фактор дают матричные элементы {1.4}, {1.5} и {2.4}, то есть остовные состояния. Может сложиться впечатление, что только эти матричные элементы определяют поправку к g -фактору. Чтобы понять, насколько точным будет значение g -фактора, если учитывать только их, найдем ошибку, которая появится при отбрасывании слагаемых {1.1}, {1.2}, {1.3}, {2.1}, {2.2}, {2.3} и {2.5}. Отношение вкладов глубокого состояния p к вкладу состояния электрона в Δ -долине для кремния $\left(\frac{r_p}{r_\Delta}\right)_{Si} = 35$, а для германия

$\left(\frac{r_p}{r_\Delta}\right)_{Ge} = 30$, то есть приблизительно вклад остовного состояния в германии такой же, как и в кремнии. Поэтому при нахождении ошибки, возникающей при отбрасывании матричных элементов состояния Δ -долины, будем полагать, что вклад различных матричных элементов в германии такой же, как и в кремнии. Основываясь на данных из Таблицы Б.1, можно найти эту ошибку:

$$e_{\parallel} = \frac{1+0.7+0.7}{1+0.7+0.7-2.6-2.6} = -0.86, \quad (\text{Б.8})$$

$$e_{\perp} = \frac{-0.5+0.3-0.2-0.3}{-0.5+0.3-0.2-0.3-3.1} = 0.18.$$

Ошибка e_{\parallel} принимает большое значение, поэтому необходимо оценить не только матричные элементы {1.4}, {1.5} и {2.4}, но и {1.1}, {1.2}, {1.3}.

Сначала вычислим значение g -фактора, рассматривая только остовные состояния.

Учет взаимодействия с состояниями атомных остовов. Найдем перпендикулярную составляющую отклонения g -фактора для Δ -долины следующим образом. Будем проводить сравнительный анализ выражений g -фактора для Si и Ge и, пользуясь тем, что в случае Si все численные значения были уже получены [110], и дали хорошее согласие с экспериментом (Табл.Б.2), попробуем провести аналогичные расчеты и для Ge.

Таблица Б.1. Матричные элементы, задействованные в вычислении g -фактора, и их относительные величины для S_i (по отношению к первому слагаемому в δg_{\parallel}). Слагаемые, ответственные за вклад остова, отмечены серым цветом. Данные взяты из работы [110].

Компонента g -фактора	Номер слагаемого	Три матричных элемента, входящие в произведение данного слагаемого			Относительные величины слагаемых
δg_{\parallel}	{1.1}	$\langle \Delta_1 p_y \Delta_5^y \rangle$	$\langle \Delta_5^y h_x \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z p_z \Delta_1 \rangle$	1
	{1.2}	$\langle \Delta_1 p_y \Delta_5^{1y} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1y} h_x \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z p_z \Delta_1 \rangle$	0.7
	{1.3}	$\langle \Delta_1 p_y \Delta_5^y \rangle$	$\langle \Delta_5^y h_x \Delta_5^{1z} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1z} p_z \Delta_1 \rangle$	0.7
	{1.4}	$\langle \Delta_1 p_y \Delta_5^{1y} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1y} h_x \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z p_z \Delta_1 \rangle$	-2.6
	{1.5}	$\langle \Delta_1 p_y \Delta_5^y \rangle$	$\langle \Delta_5^y h_x \Delta_5^{1z} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1z} p_z \Delta_1 \rangle$	-2.6
δg_{\perp}	{2.1}	$\langle \Delta_1 p_z \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z p_x \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z h_y \Delta_1 \rangle$	-0.5
	{2.2}	$\langle \Delta_1 p_z \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z h_y \Delta_1^1 \rangle$	$\langle \Delta_1^1 p_x \Delta_1 \rangle$	0.3
	{2.3}	$\langle \Delta_1 p_z \Delta_5^{1z} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1z} h_y \Delta_1^1 \rangle$	$\langle \Delta_1^1 p_x \Delta_1 \rangle$	-0.2
	{2.4}	$\langle \Delta_1 p_z \Delta_5^z \rangle$	$\langle \Delta_5^z h_y \Delta_1^t \rangle$	$\langle \Delta_1^t p_x \Delta_1 \rangle$	-3.1
	{2.5}	$\langle \Delta_1 p_z \Delta_5^{1z} \rangle$	$\langle \Delta_5^{1z} h_y \Delta_1^t \rangle$	$\langle \Delta_1^t p_x \Delta_1 \rangle$	-0.3

Таблица Б.2. Сравнение экспериментальных результатов [3] и вычисленных с учетом основных состояний значений $[110]$ для δg_{\parallel} и δg_{\perp} в кремнии и германии.

		δg_{\parallel}	δg_{\perp}
Si (Δ -долина)	Calc.	-0.0027	-0.0036
	Exp.	-0.0028	-0.0040
Ge (L-долина)	Calc.	-1.0	+0.069
	Exp.	-1.13	-0.082

Таблица Б.3 Основные зонные параметры для Δ - долин в кремнии и в германии. Данные взяты из справочника [78] и работ [110,3,111,112].

	Si (Δ)	Ge (Δ)
m_{\parallel} / m_0	0.916	1.35
$m_0 / m_{\parallel} - 1$	0.092	-0.259
m_{\perp} / m_0	0.19	0.29
$m_0 / m_{\perp} - 1$	4.263	2.448
Δ_{Γ}	0.043 эВ	0.289 эВ
E_{15}	4.27 эВ	4.37 эВ
δg_{\parallel}	-0.0028	(в L) -1,13 (в Γ) 5.0023
δg_{\perp}	-0.0040	(в L) -0,082 (в Γ) 5.0023
E_{1t}	100 эВ	120 эВ
Δ_{1t}	0,74 эВ	4,1 эВ

В таблице приняты обозначения:

E_{15} – энергетический зазор между Δ_1 (в точке минимума) и Δ_5 ;

E_{1t} – энергетический зазор между Δ_1 (в точке минимума) и основным состоянием (3p для германия и 2p для кремния);

Δ_{1t} – спин-орбитальное расщепление основного состояния;

Δ_{Γ} - спин-орбитальное расщепление в точке Γ .

$$\delta g_{\perp} = \text{Re} \frac{4}{mi} \frac{1}{E_{15} E_{1t}} \langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle \times \langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle \times \langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle. \quad (\text{Б.9})$$

Здесь принято, что продольная составляющая g -фактора – это g_{xx} , а перпендикулярная – g_{yy} , $|\Delta_1\rangle$ – состояния зоны проводимости, $|\Delta_5^z\rangle$ – состояния валентной зоны, $|\Delta_1^t\rangle$ – остоновые состояния, E_{15} – энергетический зазор между зоной проводимости и валентной зоной, E_{1t} – энергетический зазор между зоной проводимости и зоной остоновых состояний. Справочные данные (Таблица Б.3) дают значения энергетических зазоров для германия $E_{15}=4,37$ эВ и $E_{1t}=120$ эВ, а для кремния $E_{15}=4.27$ эВ и $E_{1t}=100$ эВ. В статье Cardona и Pollak'a [111] приводятся результаты вычисления матричного элемента $\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle$. Для германия он равен 1.08, а для кремния 1.14 (значения приведены в атомных единицах, использованных в работе [111]).

Рассмотрим теперь матричный элемент $\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle$. Для оценки различия его значений для кремния и для германия обратимся к методу ортогональных плоских волн (ОПВ), который применяется в работе Liu [110] для вычисления спин-орбитального расщепления энергетических зон в Si и Ge. Согласно методу ОПВ волновая функция электрона может быть разделена на «плавную» функцию в виде плоской волны и остовное слагаемое, сходное со слагаемым в атомной волновой функции:

$$\psi_k^{\alpha} = \sum_K a(|\vec{k} + \vec{K}|) |(\vec{k} + \vec{K})\rangle^{\alpha} + \sum_t b_{k,t}^{\alpha} |\phi_{k,t}^{\alpha}\rangle. \quad (\text{Б.10})$$

Здесь α - символ для неприводимого представления, используемый для указания симметрии волновой функции, \vec{k} - волновой вектор и \vec{K} - обратный вектор решетки. Плоские волны определены вектором $|\vec{k} + \vec{K}|$. Символ $|\rangle^{\alpha}$ указывает на нормированную симметризованную комбинацию плоских волн. Второе слагаемое в выражении (Б.10) представляет собой вклад остова.

Так как волновые функции электрона зоны проводимости выбираются ортогональными остоным функциям, то с некоторым приближением можно предположить

$$\begin{aligned} \langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle &= \sum_K a(|\vec{k} + \vec{K}|) \langle \Delta_1^t | p_x | (\vec{k} + \vec{K}) \rangle^\alpha + \sum_t b_{k,t}^\alpha \langle \Delta_1^t | p_x | \phi_{k,t}^\alpha \rangle \sqcup \\ &\sqcup \sum_t b_{k,t}^\alpha \langle \Delta_1^t | p_x | \phi_{k,t}^\alpha \rangle. \end{aligned} \quad (\text{Б.11})$$

Итак, необходимо сравнить коэффициенты $b_{k,t}^\alpha$ и остоные волновые функции кремния и германия. Коэффициенты $b_{k,t}^\alpha$ можно выразить через коэффициенты плоской волны $a(|\vec{k} + \vec{K}|)$ и коэффициенты ортогонализации $A_t(|\vec{k} + \vec{K}|)$, использующиеся при зонных вычислениях методом ОПВ. Коэффициенты плоской волны для различных веществ одной и той же кристаллической структуры сильно не отличаются друг от друга. Liu сравнил свои вычисления для германия с результатами Kleinman'a и Phillips'a [112] для кремния и обнаружил соответствие между коэффициентами плоской волны для наиболее важных состояний. Коэффициенты ортогонализации A_t в германии и кремнии также не сильно отличаются по абсолютной величине: для Ge значение $-i A_t$ для $3p$ состояний равно -0.09 , а в Si для $2p$ состояний — 0.08 [113]. Следовательно, можно утверждать, что величины матричных элементов $\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle$ в германии и кремнии близки друг к другу.

Матричный элемент $\langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle$ подобным образом можно свести к матричному элементу $b_\Delta \langle \Delta_5^t | h | \Delta_1^t \rangle = b_{\Delta_1^t} \Delta_{s-o}^{3p}$. Т. к. коэффициенты $b_{\Delta_1^t}$ у кремния и германия сходны, то при сравнении матричных элементов необходимо знать только значения спин-орбитального расщепления остоных состояний, для кремния оно составляет 0.74 эВ, а для германия — 4.1 эВ.

Теперь можно найти вклад от остоных состояний в поправку δg_\perp^{Ge} . Сначала рассмотрим самое большое остоное слагаемое $\{2.4\}$, составим пропорцию:

$$\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2.4\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2.4\}}} = \frac{E_{15}^{Si} E_{1t}^{Si}}{E_{15}^{Ge} E_{1t}^{Ge}} \frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}} \quad (\text{B.12})$$

Используя следующие численные значения

$$\frac{E_{15}^{Si}}{E_{15}^{Ge}} = \frac{4.27}{4.37}, \quad \frac{E_{1t}^{Si}}{E_{1t}^{Ge}} = \frac{100}{120}, \quad \frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Si}} = \frac{1.08}{1.14}, \quad \frac{\langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^z | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Si}} = \frac{4.1}{0.74},$$

$$\frac{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}} = \frac{-0.09}{0.08} = -1.125,$$

получим соотношение между слагаемыми {2.4} в кремнии и в германии: $\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2.4\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2.4\}}} = -4.8$

Соотношение для основного слагаемого {2.5},

$$\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2.5\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2.5\}}} = \frac{E_{1t}^{Si} E_{1t}^{Si}}{E_{1t}^{Ge} E_{1t}^{Ge}} \frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}},$$

здесь отношение матричных элементов импульса сводится к отношению коэффициентов $-iA$,

для кремния и германия, отношение матричных элементов спин-орбитального

взаимодействия сводится к отношению Δ_{s-o}^{3p} для германия и Δ_{s-o}^{2p} для кремния.

В результате имеем:

$$\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2.5\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2.5\}}} = \left(\frac{100}{120} \right)^2 \cdot \left(\frac{-0.09}{0.08} \right) \cdot \frac{4.1}{0.73} = -4.39$$

Соотношение для основного слагаемого {2.3},

$$\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2.3\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2.3\}}} = \frac{E_{11'}^{Si} E_{1t}^{Si}}{E_{11'}^{Ge} E_{1t}^{Ge}} \frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1^t | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}},$$

здесь $E_{11'} = E_{\Delta_1} - E_{\Delta_1^t}$, $E_{11'}^{Si} = 10.8$ эВ, $E_{11'}^{Ge} = 12.1$ эВ (значения получены с помощью **кр**

метода, описанного далее),

$$\text{отношение матричных элементов} \quad \frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^{tz} \rangle^{Si}} = \frac{-0.09}{0.08}, \quad \frac{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^{tz} | h_y | \Delta_1^t \rangle^{Si}} = \frac{4.1}{0.74},$$

а матричные элементы $\langle \Delta_1^1 | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}$ и $\langle \Delta_1^1 | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}$ были вычислены нами с помощью **kr** метода. Согласно результатам вычислений отношение этих матричных элементов

$$\frac{\langle \Delta_1^1 | p_x | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1^1 | p_x | \Delta_1 \rangle^{Si}} = \frac{0.3016}{0.1285} = 2.347$$

$$\frac{(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2,3\}}}{(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2,3\}}} = \frac{100}{120} \cdot \frac{10.8}{12.1} \cdot \left(\frac{-0.09}{0.08} \right) \cdot \frac{0.3016}{0.1285} \cdot \frac{4.1}{0.74} = -10.88$$

Теперь, зная основную поправку δg_{\perp}^{Si} , можно найти основную поправку δg_{\perp}^{Ge} . Основную поправку для кремния можно найти, основываясь на данных из статьи Liu (см. Таблицу Б.1, где выделены вклады различных зон в g -фактор). Для поправки $(\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2,4\}}$ вклад основных состояний составляет – 3.1 относительных единиц, а полное значение поправки – 4.4 относительных единиц. Взяв значение полной поправки $\delta g_{\perp}^{Si} = -0.004$ [3], можно найти

$$\delta g_{\perp}^{core}(Si) = (-0.004) \cdot \frac{3.1}{4.4} = -0.0028. \text{ Далее можно найти вклад основного состояния } \{2.4\} \text{ для}$$

$$\text{германия } (\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2,4\}} = (\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2,4\}} \cdot (-4.8) = 0.0135.$$

$$\text{Аналогично } (\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2,3\}} = (\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2,3\}} \cdot (-10.88) = (-0.004) \cdot \frac{0.2}{4.4} \cdot (-10.88) = 0.002 \text{ и}$$

$$(\delta g_{\perp}^{Ge})_{\{2,5\}} = (\delta g_{\perp}^{Si})_{\{2,5\}} \cdot (-4.39) = (-0.004) \cdot \frac{0.3}{4.4} \cdot (-4.39) = 0.0012.$$

В итоге получаем полное значение вклада основных состояний

$$\delta g_{\perp}^{Ge} = 0.0135 + 0.002 + 0.0012 = 0.0167$$

Произведем подобные вычисления для $\delta g_{\parallel}^{Ge}$. Аналогично, учитывая только основные слагаемые, имеем [111]:

$$\delta g_{\parallel} = 2 \cdot \text{Re} \frac{4}{mi} \frac{1}{E_{15} E_{1t}} \langle \Delta_1 | p_y | \Delta_5^{ty} \rangle \langle \Delta_5^{ty} | h_x | \Delta_5^z \rangle \langle \Delta_5^z | p_z | \Delta_1 \rangle.$$

$$\frac{\delta g_{\parallel}^{Ge}}{\delta g_{\parallel}^{Si}} = \frac{E_{15}^{Si} E_{1t}^{Si}}{E_{15}^{Ge} E_{1t}^{Ge}} \frac{\langle \Delta_1 | p_y | \Delta_5^{ty} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_y | \Delta_5^{ty} \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_5^z | h_x | \Delta_5^{ty} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^z | h_x | \Delta_5^{ty} \rangle^{Si}} \frac{\langle \Delta_5^z | p_z | \Delta_1 \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^z | p_z | \Delta_1 \rangle^{Si}} = -4.8$$

Здесь использовано $\frac{\langle \Delta_1 | p_y | \Delta_5^{ty} \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_y | \Delta_{51}^{ty} \rangle^{Si}} = \frac{-0.09}{0.08} = -1.125$, $\frac{\langle \Delta_5^{ty} | h_x | \Delta_5^z \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_5^{ty} | h_x | \Delta_5^z \rangle^{Si}} = \frac{4.1}{0.74}$,

$\frac{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Ge}}{\langle \Delta_1 | p_z | \Delta_5^z \rangle^{Si}} = \frac{1.08}{1.14}$. Данные пропорции были составлены на основе рассуждений

аналогичных рассуждениям для δg_{\perp} , приведённым выше.

Для $\delta g_{\parallel}^{Si}$ вклад остовных состояний составляет -5.2 относительных единиц, а полное значение поправки $\delta g_{\parallel}^{Si}$ составляет -2.8 относительных единиц (за единицу принят вклад зоны Δ_5). Взяв значение полной поправки g -фактора равным экспериментальному

$\delta g_{\parallel}^{Si} = -0.0028$ [3], можно получить $\delta g_{\parallel}^{core}(Si) = \delta g_{\parallel}^{Si} \cdot \frac{5.2}{2.8} = (-0.0028) \cdot \frac{5.2}{2.8} = -0.0052$. Для

параллельной составляющей g -фактора получаем $\delta g_{\parallel}^{core}(Ge) = \delta g_{\parallel}^{core}(Si) \cdot (-4.8) = 0.025$.

Перейдем к нахождению вклада остальных зон в g -фактор электрона в германии.

Используя **kr** метод, описанный в статье [111], можно вычислить матричные элементы {1.1}, {1.2}, {1.3} и {2.1}, {2.2}, необходимые для поправки к g -фактору. В данной статье было показано, что для корректного описания энергетических зон Si и Ge достаточно использовать **kr** гамильтониан 15x15. Решив задачу на собственные значения путем диагонализации такого гамильтониана и получив волновые функции, можно вычислить необходимые матричные элементы операторов спин-орбитального взаимодействия и импульса между зоной проводимости и остальными зонами, вносящими существенный вклад в поправку к g -фактору электрона в Δ -долине германия. Кроме остовных состояний ощутимый вклад в поправку дают состояния валентной зоны и состояния зоны Δ_1^1 (см. Таблицу Б.1). Поэтому в слагаемых типа:

$$\sum_{\mu\nu} p_{\mu 0}^y \cdot \frac{1}{E_{\mu} - E_0} \cdot p_{\mu\nu}^z \cdot \frac{1}{E_{\nu} - E_0} \cdot h_{\nu 0}^x,$$

которые входят в поправку к g-фактору электрона будет стоять суммирование именно по этим зонам. Здесь E_0 – положение дна зоны проводимости в Δ -долине.

Покажем, как строится $\mathbf{k}\mathbf{p}$ гамильтониан 15×15 .

Запишем уравнение Шредингера (в атомных единицах $\hbar = 1$, 1 ед. энергии = $1Ry$, 1 ед. массы = $2m$):

$$[-\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\Psi = E\Psi, \quad (\text{Б.13})$$

здесь $V(\mathbf{r})$ - потенциал, создаваемый кристаллической решеткой.

Решениями данного уравнения будут функции Блоха $\Psi = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \times u_{n,k}(\mathbf{r})$, где функции

$u_{n,k}(\mathbf{r})$ имеют период кристаллической решетки. Подставив блоховские функции в

уравнение (1) получим:

$$[H_0 + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + k^2]u_{n,k}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n,k}(\mathbf{r}), \quad (\text{Б.14})$$

Здесь H_0 – гамильтониан для $k=0$. Слагаемое k^2 рассматривается как простой сдвиг по шкале энергии. Слагаемое $2\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ является стандартным $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ гамильтонианом. Если записать выражение (2) в матричной форме по отношению к состояниям при $\mathbf{k} = 0$, то H_0 и k^2 имеют только диагональные элементы, а матрица $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ имеет только недиагональные элементы в кристаллах с центром инверсии.

Количество элементов $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ матрицы сильно уменьшается по симметричным соображениям.

Приведем некоторые из них.

Вектор состояния в точке $\Gamma (\mathbf{k} = 0)$ имеет компоненты:

Γ_1^l		-0.966
$\Gamma_{25'}^l(X)$		0.00
$\Gamma_{25'}^l(Y)$		0.00
$\Gamma_{25'}^l(Z)$		0.00
$\Gamma_{2'}^l$	имеющие следующие	0.0728
$\Gamma_{15}(x)$	энергии	0.232
$\Gamma_{15}(y)$	(ат. ед.)	0.232
$\Gamma_{15}(z)$		0.232
Γ_1^u		0.571
$\Gamma_{12'}(1)$		0.770
$\Gamma_{12'}(2)$		0.770
$\Gamma_{25'}^u(X)$		1.25
$\Gamma_{25'}^u(Y)$		1.25
$\Gamma_{25'}^u(Z)$		1.25
$\Gamma_{2'}^u$		1.35

Состояния X, Y, Z ($\Gamma_{25'}^l$ и $\Gamma_{25'}^u$) преобразуются как yz, xz, xy , где x, y, z – координаты. Три состояния зоны проводимости (Γ_{15}) преобразуются как x, y, z . Волновые функции $\Gamma_{12'}$ преобразуются как $\sqrt{3}(y^2 - z^2)$ ($\Gamma_{12'}(1)$) и $(3x^2 - r^2)$ ($\Gamma_{12'}(2)$).

Пользуясь данными свойствами можно определить компоненты матрицы оператора импульса \mathbf{p} .

Например, рассмотрим \mathbf{p}_x . Оператор \mathbf{p}_x действуя на состояние $Y(xy)$ дает y , поэтому матричный элемент \mathbf{p}_x между s -состоянием $\Gamma_{2'}$ и $Y(xz)$ $\Gamma_{25'}$ должен быть равен 0. То же самое можно сказать для матричного элемента \mathbf{p}_x между s -состоянием $\Gamma_{2'}$ и $Z(xy)$ $\Gamma_{25'}$.

А вот матричный элемент \mathbf{p}_x между s -состоянием $\Gamma_{2'}$ и $X(yz)$ $\Gamma_{25'}$ не равен 0. Обозначим его P .

$$\begin{array}{l} \Gamma_{25'} \\ X(yz) \\ Y(xz) \\ Z(xy) \end{array} \begin{array}{c} \Gamma_{2'} \\ \boxed{1} \\ \boxed{0} \\ \boxed{0} \end{array} \times P$$

Аналогичные рассуждения можно провести для состояний $\Gamma_{25'}$ и Γ_{15} . Ненулевые матричные элементы между состояниями $Y(xz)$ и z и между состояниями $Z(xy)$ и y обозначим за Q .

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c} X(yz) \\ \Gamma_{25'} Y(xz) \\ Z(xy) \end{array}
 \begin{array}{|c|c|c|}
 \hline
 x & y & z \\
 \hline
 0 & 0 & 0 \\
 \hline
 0 & 0 & 1 \\
 \hline
 0 & 1 & 0 \\
 \hline
 \end{array}
 \times Q
 \end{array}$$

Легко проверяется, что матричные элементы между состояниями $\Gamma_{25'}$ и $\Gamma_{12'}$ равны 0.

$$\begin{array}{c}
 \Gamma_{25'} \\
 \begin{array}{c} X & Y & Z \end{array} \\
 \Gamma_{12'} \begin{array}{|c|c|c|}
 \hline
 (1) & 0 & 0 & 0 \\
 \hline
 (2) & 0 & 0 & 0 \\
 \hline
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 \sqrt{3}(y^2 - z^2) \\
 (3x^2 - r^2)
 \end{array}
 \end{array}$$

Значения матричных элементов в атомных единицах (P , Q и других), входящих в матрицы

\mathbf{p}_x , \mathbf{p}_y , \mathbf{p}_z , взяты из работы [111].

$$P=1.360, P_1=0.1715, P_2=0.100, P_3=1.6231,$$

$$Q=1.070, Q_1=-0.752,$$

$$R=0.8049, R_1=1.4357, R_a=R\sqrt{2}, R_{a1}=R_1\sqrt{2}, R_b=-R/\sqrt{2}, R_{b1}=-R\sqrt{3/2}, R_{1b}=-R/\sqrt{2},$$

$$R_{1b1}=-R_1\sqrt{3/2},$$

$$T=1.2003, T_1=0.5323,$$

Приведем вид окончательных матриц \mathbf{p}_x , \mathbf{p}_y , \mathbf{p}_z

$$\mathbf{p}_x = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & R_a & 0 & 0 & 0 & 0 & P_2 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 \\
0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & R_a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{a1} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1a} & 0 & 0 & 0 & 0 & P_3 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & P_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_3 & 0 & 0 & 0
\end{array} \right)
\begin{array}{l}
\Gamma_1^l \\
\Gamma_{25'}^l(X) \\
\Gamma_{25'}^l(Y) \\
\Gamma_{25'}^l(Z) \\
\Gamma_{2'}^l \\
\Gamma_{15}(x) \\
\Gamma_{15}(y) \\
\Gamma_{15}(z) \\
\Gamma_1^u \\
\Gamma_{12'}(1) \\
\Gamma_{12'}(2) \\
\Gamma_{25'}^u(X) \\
\Gamma_{25'}^u(Y) \\
\Gamma_{25'}^u(Z) \\
\Gamma_{2'}^u
\end{array}$$

$$\mathbf{p}_y = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & R_b & -R_{b1} & 0 & 0 & 0 & P_2 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 \\
T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & R_b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1b} & 0 & 0 \\
0 & 0 & -R_{b1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -R_{1b1} & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1a} & -R_{1b1} & 0 & 0 & 0 & P_3 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
0 & 0 & P_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_3 & 0 & 0
\end{array} \right)
\begin{array}{l}
\Gamma_1^l \\
\Gamma_{25'}^l(X) \\
\Gamma_{25'}^l(Y) \\
\Gamma_{25'}^l(Z) \\
\Gamma_{2'}^l \\
\Gamma_{15}(x) \\
\Gamma_{15}(y) \\
\Gamma_{15}(z) \\
\Gamma_1^u \\
\Gamma_{12'}(1) \\
\Gamma_{12'}(2) \\
\Gamma_{25'}^u(X) \\
\Gamma_{25'}^u(Y) \\
\Gamma_{25'}^u(Z) \\
\Gamma_{2'}^u
\end{array}$$

$$\mathbf{p}_z = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & R_b & R_{b1} & 0 & 0 & 0 & P_2 \\
0 & 0 & 0 & P & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 \\
0 & 0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 \\
0 & Q & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 \\
T_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & R_b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1b} & 0 \\
0 & 0 & 0 & R_{b1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1b1} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & P_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & R_{1b} & R_{1b1} & 0 & 0 & 0 & P_3 \\
0 & 0 & 0 & P_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_3 & 0
\end{pmatrix} \begin{matrix}
\Gamma'_1 \\
\Gamma'_{25'}(X) \\
\Gamma'_{25'}(Y) \\
\Gamma'_{25'}(Z) \\
\Gamma'_{2'} \\
\Gamma_{15}(x) \\
\Gamma_{15}(y) \\
\Gamma_{15}(z) \\
\Gamma^u_1 \\
\Gamma_{12'}(1) \\
\Gamma_{12'}(2) \\
\Gamma^u_{25'}(X) \\
\Gamma^u_{25'}(Y) \\
\Gamma^u_{25'}(Z) \\
\Gamma^u_{2'}
\end{matrix}$$

Вид матриц \mathbf{h} приведен ниже (напомним, что спин-орбитальное взаимодействие

представлено в виде $H_{s-o} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V \times \vec{p}) \square \vec{\sigma} \equiv \vec{h} \square \vec{\sigma}$).

$$\mathbf{h}_x = \frac{i}{3} \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -\Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix} \begin{matrix}
\Gamma'_1 \\
\Gamma'_{25'}(X) \\
\Gamma'_{25'}(Y) \\
\Gamma'_{25'}(Z) \\
\Gamma'_{2'} \\
\Gamma_{15}(x) \\
\Gamma_{15}(y) \\
\Gamma_{15}(z) \\
\Gamma^u_1 \\
\Gamma_{12'}(1) \\
\Gamma_{12'}(2) \\
\Gamma^u_{25'}(X) \\
\Gamma^u_{25'}(Y) \\
\Gamma^u_{25'}(Z) \\
\Gamma^u_{2'}
\end{matrix}$$

$$\mathbf{h}_y = \frac{i}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \Gamma'_1 \\ \Gamma'_{25'}(X) \\ \Gamma'_{25'}(Y) \\ \Gamma'_{25'}(Z) \\ \Gamma'_2 \\ \Gamma_{15}(x) \\ \Gamma_{15}(y) \\ \Gamma_{15}(z) \\ \Gamma''_1 \\ \Gamma_{12'}(1) \\ \Gamma_{12'}(2) \\ \Gamma''_{25'}(X) \\ \Gamma''_{25'}(Y) \\ \Gamma''_{25'}(Z) \\ \Gamma''_2 \end{matrix}$$

$$\mathbf{h}_z = \frac{i}{3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{25} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \Gamma'_1 \\ \Gamma'_{25'}(X) \\ \Gamma'_{25'}(Y) \\ \Gamma'_{25'}(Z) \\ \Gamma'_2 \\ \Gamma_{15}(x) \\ \Gamma_{15}(y) \\ \Gamma_{15}(z) \\ \Gamma''_1 \\ \Gamma_{12'}(1) \\ \Gamma_{12'}(2) \\ \Gamma''_{25'}(X) \\ \Gamma''_{25'}(Y) \\ \Gamma''_{25'}(Z) \\ \Gamma''_2 \end{matrix}$$

Здесь спин-орбитальное расщепление для состояний $\Gamma'_{25'}$, $\Delta_{25'}^l = 0.29$ эВ, для состояний Γ_{15}

$\Delta_{15} = 0.36$ эВ, а для состояний $\Gamma''_{25'}$ спин-орбитальное расщепление принято равным нулю

$\Delta_{25'}^u \approx 0$, поскольку спин-орбитальное расщепление $4d$ уровня в атоме германия составляет

$\approx 5\%$ от расщепления $4p$ уровня.

Теперь задав k_x , k_y , k_z можно вычислить энергии и волновые функции, воспользовавшись возможностями программы MatLab.

На первом шаге находим значение k_x , при котором наблюдается минимум по энергии в окрестности точки Δ . Это также вычисляется с помощью программы MatLab. Согласно этим вычислениям минимум наблюдается при $k_x = 0.4619$ (в атомных единицах).

Далее можно найти значения энергии и волновые функции для $\vec{k} = (0.4619, 0, 0)$, а затем матричные элементы \mathbf{p} и \mathbf{h} .

Таким образом, мы получили следующие поправки к g -фактору.

$$\delta g_{\parallel} = 0.0114, \quad \delta g_{\perp} = -0.1317.$$

В итоге, поправка к g -фактору складывается из двух частей: из основного слагаемого и вклада ближайших зон, вычисленного с помощью **kp** метода.

Найдем итоговое значение поправки к g -фактору в германии в Δ -долине.

$$\delta g_{\parallel}^{Ge} = 0.0114 + 0.025 = 0.0389$$

Аналогично

$$\delta g_{\parallel}^{Ge} = -0.1317 + 0.0167 = -0.115$$

Таким образом, g -фактор в Δ -долине Ge равен:

$$g_{\parallel}^{Ge} = g_0 + \delta g_{\parallel}^{Ge} = 2.0023 + 0.0389 = 2.0412,$$

(Б.15)

$$g_{\perp}^{Ge} = g_0 + \delta g_{\perp}^{Ge} = 2.0023 - 0.115 = 1.8873.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Работа проводилась в ИФП СО РАН в лаборатории неравновесных полупроводниковых систем под руководством зав. лаб. д.ф.-м.н., проф. А.В. Двуреченского.

Содержание диссертации отражено в следующих публикациях :

1. *А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский, А. Ф. Зиновьева.* Эффект Зеемана для дырок в системе Ge/Si с квантовыми точками // ЖЭТФ, 2003, т. 123, № 2, с. 362–372.
2. *A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, A. F. Zinovieva.* Wave functions and g -factor of holes in Ge/Si quantum dots // Phys. Rev. B, 2003, v. 67, 205301.
3. *А. В. Двуреченский, А. И. Якимов, А. В. Ненашев, А. Ф. Зиновьева.* Квантовые точки Ge/Si во внешних электрическом и магнитном полях // Физика твердого тела, 2004, т. 46, № 1, с. 60–62.
4. *A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, A. F. Zinovieva, E. A. Golovina.* Zeeman Effect for Electrons and Holes in Ge/Si Quantum Dots // International Journal of Nanoscience, 2003, v. 2, No. 6, pp. 511–519.
5. *A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii.* Hole spin relaxation during the tunneling between coupled quantum dots // Phys. Rev. B, 2005, v. 71, 033310.
6. *А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский.* Спиновая релаксация дырок в Ge квантовых точках // Письма в ЖЭТФ, 2005, т. 82, вып. 5, с. 336-340.
7. *А. В. Двуреченский, А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев, А. И. Якимов, Н. П. Степина, В. В. Кириенко.* Спиновые эффекты в гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками // Известия ВУЗов. Материалы электронной техники, 2006, №2, с. 15–25.

8. *A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii.* Fluctuation-stimulated spin relaxation in array of Ge quantum dots // 14 Int. Symposium "Nanostructures: Physics and Technology", St. Petersburg, June 26–30, 2006, p. 363–364.
9. *А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский.* Механизм спиновой релаксации при прыжковом транспорте в двумерном массиве асимметричных квантовых точек // ЖЭТФ, 2007, т. 132, с. 436–446.
10. *A.F. Zinoveva, A.V. Dvurechenskii, N.P. Stepina, A.S. Deryabin, A.I. Nikiforov. R. Rubinger, N.A. Sobolev, J.P. Leitão, M.C. Carmo.* Spin resonance of electrons localized on Ge/Si quantum dots.// Phys. Rev. B 2008, v. 77, 115319.
11. *А. В. Двуреченский, А. В. Ненашев, А. Ф. Зиновьева.* g-фактор дырок в квантовых точках Ge/Si – Quantum Informatics – 2002. Book of Abstracts. Zvenigorod, October 1–4, 2002.
12. *А. В. Двуреченский, А. И. Якимов, А. В. Ненашев, А. Ф. Зиновьева.* «Квантовые точки Ge/Si во внешних электрическом и магнитном полях» – Нанофотоника, Нижний Новгород, 17-20 марта 2003.
13. *А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский, А. Ф. Зиновьева* «Осцилляции g-фактора возбужденных состояний в Ge/Si квантовых точках» – Тез. докл. VI-ой Российской конференции по физике полупроводников, С-Петербург, 26-31 октября, 2003.
14. *А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский, А. Ф. Зиновьева, М. Н. Тимонова.* «g-фактор, перекрытие волновых функций и локализация дырок в массиве Ge/Si квантовых точек» – Тез. докл. VI-ой Российской конференции по физике полупроводников, С.-Петербург, 26-31 октября, 2003.
15. *A. V. Nenashev, A. F. Zinovieva and A. V. Dvurechenskii.* «Spin transport in Ge/Si quantum dot array» – Autumn School on Materials Science and Electron Microscopy

- "New developments in nanostructured materials - synthesis, characterization, functionality", Berlin, September 27th - October 1st, 2003.
16. A. V. Nenashev, A. F. Zinovieva and A. V. Dvurechenskii. «Spin transport in Ge/Si quantum dot array» – International Conference «Micro- and nanoelectronics –2003». Book of Abstracts, Zvenigorod, October 6–10, 2003.
 17. A. Zinovieva, A. Nenashev, A. Dvurechenskii. “Spin transport and spin relaxation in Ge/Si quantum dots” – Abstracts of 27th International Conference on the Physics of Semiconductors, Flagstaff (Arizona, USA), July 26-30, 2004, p. 245.
 18. А.В. Ненашев, А.Ф. Зиновьева, А.В. Двуреченский. Релаксация спина при транспорте в двумерных массивах Ge/Si квантовых точек – VII российская конференция по физике полупроводников, тезисы докладов, с. 260.
 19. A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii. Spin relaxation of holes in Ge quantum dots – The International International Conference “Micro- and nanoelectronics – 2005”, Zvenigorod, Moscow region, October 3-7, 2005, book of abstracts.
 20. А.В. Двуреченский, Н.П. Степина, А.С. Дерябин, А.И. Никуфоров, R. Rubinger, N.A. Sobolev, J.P. Leitão, M.C. Carmo. ЭПР электронов, локализованных на Ge/Si квантовых точках – VIII Российская конференции по физике полупроводников, , 1 - 5 октября 2007, Екатеринбург.
- Результаты, полученные в данной работе, докладывались и обсуждались на 19 Российских и Международных конференциях, в том числе: на международных конференциях «Quantum Informatics – 2002», «Micro- and nanoelectronics» в 2003 и в 2005 годах в Звенигороде, на 11-м, 12-м, 14-м и 15-м международном симпозиуме «Nanostructures: Physics and Technology» в Санкт-Петербурге и Новосибирске, на VI-ой, VII-ой VIII-ой Российских конференциях по физике полупроводников, на 27-й международной конференции по физике полупроводников во Флагстаффе (Аризона, США) в 2004 г., на Российско-Швейцарском семинаре "Excitons and excitonic condensates in confined semiconductor systems" в Москве в 2006 г., на

международной конференции E-MRS в Страсбурге в 2007 г, на Совещании «Нанопотоника» в Нижнем Новгороде в 2003г., на конкурсах молодых ученых ИФП СО РАН и на конкурсе научных работ ИФП СО РАН (2006г.).

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность своему научному руководителю д.ф.-м.н., профессору А. В. Двуреченскому за руководство и постоянную помощь в работе.

Автор признателен к.ф.-м.н. А.В. Ненашеву, в сотрудничестве с которым были получены основные результаты данной работы, к.ф.-м.н. Н. П. Стёпиной за помощь в проведении экспериментальной части работы и всех сотрудников лаборатории неравновесных полупроводниковых систем ИФП СО РАН, в тёплой и дружественной атмосфере которой была сделана эта работа. Персональную благодарность автор выражает нашим замечательным специалистам по молекулярно-лучевой эпитаксии к.ф.-м.н. А.И. Никифорову и А. С. Дерябину, за выращенные структуры, В.А. Армбристеру и В.В. Кириенко за постоянную помощь в эксперименте, Н. И. Морозовой за химическую обработку образцов, д.ф.-м.н. А. И. Якимову за идею создания многослойных структур с квантовыми точками для локализации электронов, д.ф.-м.н. В.Л. Альперовичу за постоянный интерес к работе.

ЛІТЕРАТУРА

1. Zutic I., Fabian J., Das Sarma S.. *Spintronics: Fundamentals and applications*. – Reviews of modern physics, 2004, v.76, № 2, pp.323-410.
2. Feher G.. *Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. I. Electronic Structure of Donors by the Electron Nuclear Double Resonance Technique*. – Phys. Rev., 1959, v. 114, №5 pp.1219-1244.
Feher G. and Gere E. *Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. II. Electron Spin Relaxation Effects*. – Phys. Rev., 1959, v. 114, № 5, pp.1245-1256.
3. Wilson D. K. and Feher G. *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*. – Phys. Rev., 1961, v.124, № 4, pp.1068-1083.
4. Chiba M. and Hirai A., *Electron Spin Echo Decay Behaviours of Phosphorus Doped Silicon*. – J. Phys. Soc. Jpn., 1972, v. 33, № 3, pp.730-738.
5. Vrijen R., Yablonovitch E., Wang K., Jiang H. W., Balandin A., Roychowdhury V., Mor T., DiVincenzo D. *Electron-spin-resonance transistors for quantum computing in silicon-germanium heterostructures*. – Phys. Rev. A, 2000, v. 62, № 1, pp.012306-1 – 012306-10.
6. Kikkawa J. M., Awschalom D. D. *Resonant Spin Amplification in n-Type GaAs*. – Phys. Rev. Lett., 1998, v.80, № 19, pp.4313-4316.
7. Yakimov A. I., Stepina N. P., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., Nenashev A. V. *Interband absorption in charged Ge/Si type-II quantum dots*. – Phys. Rev. B, 2001, v. 63, № 4, pp. 045312-1 – 045312-6.
8. Averkiev N. S., Golub L. E., Willander M. *Spin relaxation in asymmetrical heterostructures*. – Фізика и техніка напівпровідників, 2002, т.36, вып.1, с. 97-103.
9. Averkiev N. S. and Golub L. E. *Giant spin relaxation anisotropy in zinc-blende heterostructures*. – Phys. Rev. B, 1999, v.60, №23, pp.15582-15584.

10. Kroutvar M., Ducommun Y., Heiss D., Bichler M., Schuh D., Abstreiter G., Finley J. *Optically programmable electron spin memory using semiconductor quantum dots.* – Nature 2004, v.432, pp. 81-84.
11. Loss D. and DiVincenzo D. *Quantum computation with quantum dots.* – Phys. Rev. A, 1998, v.57, № 1, pp. 120-126.
12. Recher P., Sukhorukov E. V. and Loss D. *Quantum Dot as Spin Filter and Spin Memory.* – Phys. Rev. Lett., 2000, v.85, №9, pp.1962-1965.
13. Grundmann M., Stier O., Bimberg D. *InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure.* – Phys. Rev. B, 1995, v. 52, № 16, pp.11969–11981.
14. Drexler H., Leonard D., Hansen W., Kotthaus J.P., Petroff P.M. *Spectroscopy of Quantum Levels in Charge-Tunable InGaAs Quantum Dots.* – Phys. Rev.Lett., 1994, v.73, № 16, p.2252-2255.
15. Miller B.T., Hansen W., Manus S., Luyken R.J., Lorke A., Kotthaus J.P., Huan S., Medeiros-Ribeiro G., Petroff P.M. *Few-electron ground states of charge-tunable self-assembled quantum dots.* – Phys.Rev.B, 1997, v.56, №11, pp.6764-6769.
16. Bayer M., Kuther A., Forchel A., Gorbunov A., Timofeev V. B., Schäfer F., Reithmaier J. P., Reinecke T. L., Walck S. N. *Electron and Hole g Factors and Exchange Interaction from Studies of the Exciton Fine Structure in In_{0.60} Ga_{0.40}As Quantum Dots.* – Phys. Rev. Lett., 1999, v.82, №8, pp. 1748-1751.
17. Zrenner A., Markmann M., Beham E., Findeis F., Bohm G., Abstreiter G. *Spatially Resolved Spectroscopy on Single Self-Assembled Quantum Dots.* – Journal of Electronic Materials, 1999, v.28, №5, pp. 542-547
18. Bayer M., Stern O., Kuther A., Forchel A.. *Spectroscopic study of dark excitons in In_xGa_{1-x}As self-assembled quantum dots by a magnetic-field-induced symmetry breaking.* – Phys. Rev. B, 2000, v.61, № 11, pp.7273-7276.

19. Patane A., Levin A., Main P. C., Eaves L., Vdovin E. E., Khanin Y. N., Dubrovskii Y. V., Henini M., Hill G. *Magnetotunnelling spectroscopy for probing the electron wave functions in self-assembled quantum dots.* – Physica B 2001, v. 298, pp.254-259.
20. Bayer M., Timofeev V.B., Gutbrod T., Forchel A., Steffen R., Oshinowo J. *Enhancement of spin splitting due to spatial confinement in $In_xGa_{1-x}As$ quantum dots.* – Phys.Rev.B, 1995, v.52, №16, R11623-R11625.
21. Yafet Y. *g-factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons.* – Solid State Physics, 1963, v.14, pp. 1-98.
22. Аронов А.Г., Лянда-Геллер Ю.Б., Пикус Г.Е. *Спиновая поляризация электронов электрическим током.* – ЖЭТФ, 1991, v.100, с. 973.
23. Chaplik A.V., Entin M.V., Magarill L.I. *Spin orientation of electrons by lateral electric field in 2D system without inversion symmetry.* – Phys. E, 2002, v. 13, №2-4, pp. 744-747.
24. Рашба Э.И. *Свойства полупроводников с петлей экстремумов. Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле перпендикулярном плоскости петли.* – ФТТ, 1960, т.2, с.1224.
25. Ohkawa F. J., Uemura Y. *Quantized surface states of a narrow gap semiconductors.* – J. Phys. Soc. Jpn.,1974, v.37, p.1325.
26. Васько Ф. Т. *Спиновое расщепление спектра двумерных электронов, обусловленное поверхностным потенциалом.* – Письма в ЖЭТФ, 1979, т.30, с.574.
27. Бычков Ю.А., Рашба Э. И. *Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра.* – Письма в ЖЭТФ 1984, т. 39, вып. 2, с. 66-69.
28. Bychkov Y. A., Rashba E. I. *Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers.* – J. Phys. C: Solid State Phys., 1984, v.17, pp.6039-6045.
29. Dresselhaus G. *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures* – Phys. Rev., 1955, v.100, №2, pp.580-586.

30. Дьяконов М. И., Качоровский В. Ю. *Спиновая релаксация двумерных электронов в полупроводниках без центра инверсии*. – ФТП, 1986, т.20, вып.1, с.178-189.
31. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. *Квантовая электродинамика*. – М.: Наука, 1989. – 728 с.
32. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. – М.: Наука, 1989. – 768 с.
33. Киттель Ч. *Квантовая теория твердых тел* – М.: Наука, 1967. – 492 с.
34. Калевич В.К., Захарченя Б.П., Фёдорова О.М. *Сильная анизотропия g-фактора электронов проводимости в квантовых ямах GaAs/AlGaAs*. – Физика твёрдого тела, 1995, т. 37, вып.1, с.283-287.
35. Ивченко Е.Л., Киселёв А.А. *Электронный g-фактор в квантовых ямах и сверхрешетках*. – Физика и техника полупроводников, 1992, т. 26, вып.3, с.1471-1479.
36. Kiselev A.A., Ivchenko E.L. *Electron g factor in one- and zero-dimensional semiconductor nanostructures*. – Phys.Rev.B, 1998, v.58, № 24, p.16353-16359.
37. Киселёв А.А., Моисеев Л.В. *Зеемановское расщепление состояний тяжёлой дырки в гетероструктурах A_3B_5 и A_2B_6* . – ФТТ, 1996, т. 38, вып. 5, с.1574-1585.
38. Winkler R., Papadakis S.J., De Poortere E.P., Shayegan M. *Highly Anisotropic g-Factor of Two-Dimensional Hole Systems*. – Phys.Rev.Lett., 2000, v.85, № 21, pp.4574-4577.
39. Kiselev A.A., Kim K.W. *In-plane light-hole g factor in strained cubic heterostructures*. – Phys.Rev.B, 2001, v.64, №12, pp.125303-1 – 125303-7.
40. Marie X., Amand T., Jeune P., Paillard M., Renucci P., Golub L. E., Dymnikov V. D., Ivchenko E. L. *Hole spin quantum beats in quantum-well structures*. – Phys. Rev. B 1999, v. 60, №8, pp. 5811-5817.
41. Бир Г. Л., Пикус Г. Е., *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. – М.: Наука, 1972. – 584 с.

42. Datta S., Das B. *Electronic analog of the electro-optic modulator.* – Appl. Phys. Lett., 1990, v.56, №7, pp.665-667.
43. Schliemann J., Carlos Egues J., Loss D. *Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor.* – Phys. Rev. Lett. 2003, v. 90, №14, pp.146801-1 – 146801-4.
44. Kane B.E. *A Silicon-based Nuclear Spin Quantum Computer.* – Nature, 1998, v.393, № 5, pp. 133-137.
45. Kane B.E. *Silicon-based Quantum Computation.* – 2000, E-print arXiv: quant-ph/0003031v1, 14 p.
46. Kikkawa J.M., Awschalom D.D. *Lateral Drag of Spin Coherence in Gallium Arsenide.* –Nature, 1999, v.397, pp.139-141.
47. Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П., Соколов Л.В., Чикичев С.И. *Искусственные подложки GeSi – достижения и проблемы.* - ФТП 2003, т. 37, вып.5, с. 513 - 538.
48. Jiang H. W., Yablonovitch E. *Gate-Controlled Electron Spin Resonance in GaAs/AlGaAs Heterostructure.* – Phys. Rev. B 2001 v. 64, pp.041307-1 – 041307-4.
49. Zanardi P., Rossi F. *Quantum Information in Semiconductors: Noiseless Encoding in Quantum-Dot Array.* – Phys. Rev. Lett., 1998, v.81, №21, pp. 4752-4755.
50. Shklyaeв A., Shibata M., Ichikawa M. *Instability of 2D Ge layer near the transition to 3D islands on Si(111).* – Thin Solid Films, 1999, v. 343/344, pp. 532-536.
51. Nenashev A. V., Dvurechenskii A. V., Zinovieva A. F. *Wave functions and g-factor of holes in Ge/Si quantum dots.* – Phys. Rev. B, 2003, v. 67, №20, pp. 205301-1 – 205301-10
52. Titkov A. N., Safarov V. I., and Lampel G, in *Physics of Semiconductors, Proceedings of the Fourteenth International Conference*, edited by B. L. H. Wilson, IOP Conf. Proc. No. 43 (Institute of Physics and Physical Society, London, 1978), p. 1031.
53. Schneider P., Kainz J., Ganichev S.D., Bel'kov V.V., Danilov S.N., Glazov M.M., Golub L.E., Rössler U., Wegscheider W., Weiss D., Schuh D., Prettl W. *Spin relaxation times of 2D holes*

- from spin sensitive bleaching of inter-subband absorption.* – J. Appl. Phys. 2004, 96, №1, pp.420-424.
54. Bayer M., Ortner G., Stern O., Kuther A., Gorbunov A. A., Forchel, Hawrylak A. P., Fafard S., Hinzer K., Reinecke T. L., Walck S. N., Reithmaier J. P., Klopff F., Schäfer F. *Fine structure of neutral and charged excitons in self-assembled In(Ga)As/(Al)GaAs quantum dots* – Phys. Rev. B 2002, v.65, pp. 195315-1 – 195315-23.
55. *Оптическая ориентация.* – под ред. Б. П. Захарчени и Ф. Майера. – Л.: Наука, 1989. – 408 с.
56. Lampel G. *Nuclear dynamic polarization by optical electronic saturation and optical pumping in semiconductors.* – Phys. Rev. 1968, v. 20, №10, pp. 491 - 493.
57. Epstein R. J., Fuchs D. T., Schoenfeld W. V., Petroff P. M., and Awschalom D. D., *Hanle effect measurements of spin lifetimes in InAs self-assembled quantum dots.* – Appl. Phys. Lett., 2001, v.78, №6, pp.733 -735.
58. Engel H.-A., Loss D. *Detection of Single Spin Decoherence in a Quantum Dot via Charge Currents.* – Phys. Rev. Lett., 2001, v.86, №20, pp.4648-4651
59. Wilamowski Z., Jantsch W., Malissa H., Rossler U. *Evidence and evaluation of the Bychkov-Rashba effect in SiGe/Si/SiGe quantum wells.* – Phys. Rev. B, 2002, v.66, №19, pp. 195315-1 – 195315-6.
60. Graeff C. F. O., Brandt M. S., Stutzmann M., Holzmann M., Abstreiter G., Schäffler F. *Electrically detected magnetic resonance of two-dimensional electron gases in Si/SiGe heterostructures.* - Phys. Rev. B 1999, v.59, № 20, pp.13242 - 13250.
61. Tyryshkin A. M., Lyon S. A., Jantsch W., Schäffler F. *Spin Manipulation of Free Two-Dimensional Electrons in Si/SiGe Quantum Well.* – Phys. Rev. Lett. 2005, v.94, pp. 126802-1 – 126802-4.
62. Malissa H., Jantsh W., Chen G., Gruber D., Lichtenberger H., Shäffler F., Wilamowski Z., Tyryshkin A., Lyon S. *Investigation of the spin properties of electrons in zero-dimensional SiGe*

- structures by electron paramagnetic resonance.* – Material Science and Engineering B, 2006, v.126, pp.172–175.
63. Zhong Z., Bauer G. *Site-controlled and size-homogeneous Ge islands on prepatterned Si(001) substrates* Appl. Phys. Lett. 2004, v.84, pp.19922-19924
64. Yakimov A.I., Dvurechenskii A.V., Nikiforov A.I., Pcheljakov O.P. *Formation of Zero-Dimensional Hole States in Ge/Si Heterostructures Probed with Capacitance Spectroscopy.* – Thin Solid Films, 1998, v.336, pp.332-335.
65. Ненашев А. В., Двуреченский А. В. *Пространственное распределение упругих деформаций в структурах Ge/Si с квантовыми точками.* – ЖЭТФ, 2000, т. 118, № 3, с. 570–578.
66. Van de Walle C. G. *Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory.* – Phys. Rev. B, 1989, v. 39, № 3, pp. 1871–1883.
67. Абрагам А., Блини Б., *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов.* Том 1, М.: Мир, 1972. – 652 с.
68. Двуреченский А. В., Ненашев А. В., Якимов А. И. *Электронная структура квантовых точек Ge/Si.* – Известия академии наук, серия физическая, 2002, т. 66, вып. 2, с. 156–159.
69. Харрисон У. *Электронная структура и свойства твердых тел.* Том 1– М.: Мир, 1983. – 381 с.
70. Chadi D. J., Cohen M. L. *Tight-Binding Calculations of the Valence Bands of Diamond and Zincblende Crystals.* – Physica Status Solidi (b), 1975, v. 68, pp. 405–419
71. Slater J. C., Koster G. F. *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem.* – Phys. Rev., 1954, v. 94, № 6, pp. 1498–1524.
72. Jancu J.-M., Scholz R., Beltram F., Bassani F. *Empirical sp³* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters.* – Phys. Rev. B, 1998, v. 57, № 11, pp. 6493–6507.

73. Chadi D. J. *Spin-orbit splitting in crystalline and compositionally disordered semiconductors.* – Phys. Rev. B, 1977, v. 16, № 2, pp. 790–796.
74. Кунин С. *Вычислительная физика.* – М.: Мир, 1992. – 518 с.
75. Kiselev A. A., Rossler U. *Quantum wells with corrugated interfaces: Theory of electron states.* – Phys. Rev. B, 1994, v. 50, № 19, pp. 14283–14286.
76. Pedersen F. B., Chang Y.-C. *Energy levels of one and two holes in parabolic quantum dots.* – Phys. Rev. B, 1996, v. 53, № 3, pp. 1507–1516.
77. Wang L.-W., Zunger A. *Solving Schrödinger's equation around a desired energy: Application to silicon quantum dots.* – J. Chem. Phys., 1994, v. 100, № 3, pp. 2394–2397.
78. Dargys A., Kundrotas J. *Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP.* – Vilnius: Science and Encyclopedia Publishers, 1994. – 264 p.
79. Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C. *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals.* – Phys. Rev. 1955, v. 98, № 2, pp. 368 – 384.
80. Winkler R., Merkle M., Darnhofer T., Rössler U. *Theory for the cyclotron resonance of holes in strained asymmetric Ge-SiGe quantum wells.* - Phys. Rev. B 1996, v.53, № 16, pp. 10858 – 10865.
81. Lawaetz P. *Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors.* - Phys. Rev. B 1971, v. 4, № 10, pp.3460 – 3467.
82. Van Vechten J. A. *Quantum Dielectric Theory of Electronegativity in Covalent Systems. I. Electronic Dielectric Constant.* – Phys. Rev. 1969, v. 182, № 3, pp. 891 – 905.
83. Hensel J. C., Suzuki K. *Anisotropy of the g factor of the free hole in Ge and conduction-band spin-orbit splitting.* – Phys. Rev. Lett., 1969, v. 22, № 16, pp. 838–840.
84. Aggarwal R. L. *Stress-Modulated Magnetorefectance for the Direct Transitions $\Gamma_{25'}^{3/2} \rightarrow \Gamma_2$ and $\Gamma_{25'}^{1/2} \rightarrow \Gamma_2$ in Germanium.* – Phys. Rev. B, 1970, v. 2, № 2, pp. 446–458.

85. Альтшулер С. А., Козырев Б. М.. *Электронный парамагнитный резонанс.* – М. ФИЗМАТЛИТ, 1961. – 368 с.
86. Feher G, Hensel J.C., Gere E. A. *Paramagnetic Resonance Absorption from Acceptors in Silicon.* - Phys. Rev. Lett. 1960, V. 5, pp. 309 – 311.
87. Newbrand H. *ESR from Boron in Silicon at Zero and Small External Stress.* - Phys. Stat. Sol. (b) v. 86, pp.269-275.
88. Haendel K.-M., Winkler R., Denker U., Schmidt O.G., Haug R. J. *Giant Anisotropy of Zeeman Splitting of Quantum Confined Acceptors in Si/Ge* – Phys. Rev. Lett. 2006, v. 96, pp. 086403-1 – 086403-4.
89. Soepangkat H. P., Fisher P.. *Transverse Zeeman Effect of the Excitation Spectra of Boron and Thallium Impurities in Germanium* - Phys. Rev. B 1973, v.8, pp.870 – 893.
90. Broeckx J, Clauws P, Van den Steen K and Vennik J. *Zeeman effect in the excitation spectra of shallow acceptors in germanium: experimental* - J. Phys. C: Solid State Phys. 1979, v. 12, pp. 4061-4079.
91. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. *Электронные свойства легированных полупроводников.* – М: Наука, 1979. – 416 с.
92. Roth L. M. *g Factor and Donor Spin-Lattice Relaxation for Electrons in Germanium and Silicon.* – Phys. Rev., 1960, v. 118, № 6, pp. 1534 – 1540.
93. J. A. Chroboczek, E. W. Prohofsky, and R. J. Sladek. *Magnetically Induced Spin-Reversal Transitions in Impurity Hop Conduction in n-Type Germanium.*– Phys. Rev. 1968, v.169, № 3, pp. 593-602.
94. A.F. Zinovieva, A.V. Nenashev, A.V. Dvurechenskii. *Hole spin relaxation during the tunneling between coupled quantum dots.* – Phys. Rev. B 2005, v.71, pp. 033310-1 – 033310-4.
95. Гантмахер В. Ф., *Электроны в неупорядоченных средах.* – М: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 174 с.

96. Зиновьева А. Ф., Ненашев А. В., Двуреченский А. В.. *Спиновая релаксация дырок в Ge квантовых точках*. – Письма в ЖЭТФ, 2005, т. 82, вып. 5, с. 336-340.
97. Zinovieva A. F., Nenashev A. V., Dvurechenskii A. V.. *Fluctuation-stimulated spin relaxation in array of Ge quantum dots*. – 14 Int. Symposium "Nanostructures: Physics and Technology", St. Petersburg, June 26–30, 2006, pp 363–364.
98. Yakimov A. I., Stepina N. P., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., Nenashev A. V. *Excitons in charged Ge/Si type-II quantum dots*. – Semicond. Sci. Technol., 2000, v. 15, pp 1125–1130.
99. A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov, A. A. Bloshkin, A. V. Nenashev, V. A. Volodin. *Electronic states in Ge/Si quantum dots with type-II band alignment initiated by space-charge spectroscopy*. – Phys. Rev. B, 2006, v. 73, pp. 115333-1 – 115333-8.
100. А. И. Якимов, А. В. Двуреченский, А. А. Блошкин, А. В. Ненашев. *Связывание электронных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками 2-го типа*. – Письма в ЖЭТФ, 2006, т. 83, вып. 4, с. 189–194.
101. Shäffler F. *High-mobility Si and Ge structures*. – Semicond. Sci. Technol., 1997, v. 12, pp.1515-1549.
102. Breit G., Rabi I. I. *Measurement of nuclear spin*. – Phys. Rev. 1931, v.38, № 11, pp. 2082-2083.
103. Wilamowski Z., Jantsch W. *Suppression of spin relaxation of conduction electrons by cyclotron motion*. – Phys. Rev. B, 2004, v. 69, № 3, p.035328-1 – 035328-10.
104. Дьяконов М. И., Перель В. И. *Спиновая релаксация электронов проводимости в полупроводниках без центра инверсии*. – ФТТ, 1972, т.13, с.3581.
105. Сликтер Ч. *Основы теории магнитного резонанса*. – М.: Мир, 1967. – 324 с.
106. Ando T., Akera H. *Connection of envelope functions at semiconductor interfaces. II. Mixings of Γ and X valleys in GaAs/Al_xGa_{1-x}As*. – Phys. Rev. B, 1989, v. 40, № 17, pp 11619–11633.

107. Fu Y., Willander M., Ivchenko E. L., Kiselev A. A. *Valley mixing in GaAs/AlAs multilayer structures in the effective-mass method.* – Phys. Rev. B, 1993, v. 47, № 20, pp 13498–1350
108. Брагинский Л. С., Романов Д. А. *Междолинная конверсия на границе. Микроскопическая модель.* – ФТТ, 1997, т. 39, № 5, с. 839–843.
109. Keating P. N. *Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure.* – Phys. Rev., 1966, v. 145, № 2, pp 637–645.
110. L. Liu. *Effects of Spin-Orbit Coupling in Si and Ge.* – Phys. Rev., 1962, v. 126, № 4, pp. 1317–1328.
111. Cardona M., Pollak F. H.. *Energy-Band Structure of Germanium and Silicon: The k-p Method.* – Phys. Rev., 1966, v.142, № 2, pp.530–543.
112. Kleinman L., Phillips J. C.. *Crystal Potential and Energy Bands of Semiconductors. III. Self-Consistent Calculations for Silicon.* – Phys. Rev., 1960, v.118, № 5, pp.1153–1167.
113. Woodruff T. O. *Application of the Orthogonalized Plane-Wave Method to Silicon Crystal.* – Phys. Rev. 1956, v. 103, № 5, pp. 1159-1166.