

УДК 538.9:537.874

МЕХАНИЗМ ПЕРЕНОРМИРОВКИ ФАКТОРА ЛАНДЕ И ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ В МАЛЫХ СФЕРИЧЕСКИХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

© 2019 г. А. М. Мандель¹*, В. Б. Ошурко¹, Е. Е. Карпова¹¹Московский государственный технический университет «СТАНКИН»,
Российская Федерация, 127994 Москва, Вадковский пер., 1

*E-mail: arkadimandel@mail.ru

Поступила в редакцию 27.04.2018 г.

После доработки 27.04.2018 г.

Принята к публикации 30.05.2018 г.

С помощью модификации теории Кейна построена модель, описывающая механизм формирования эффективной массы и g -фактора связанных электронов в квантовых точках размером порядка нескольких нанометров. Показано, что эти величины критически зависят от размеров точки и значительно отличаются от соответствующих значений для объемного полупроводника. Эффективная масса и g -фактор влияют на энергию связи электрона в квантовой точке в магнитном поле, и при этом сами определяются этой энергией связи, что в итоге и формирует локальную зонную структуру в окрестности квантовой точки. Для ковариантной гетероструктуры InAs/AlSb рассчитаны характеристики, при которых квантовая точка локализует не более одного электрона (не локализуя при этом дырки) и потому может служить прототипом твердотельного кубита с управляемым g -фактором.

DOI: 10.1134/S0033849419100085

Изучение поведения электронного фактора Ланде (g -фактора) в гетероструктурах типа малых квантовых точек чрезвычайно актуально в связи с проблемой квантовой обработки информации (см., например, обзоры [1–3]). Этот вопрос исследуется уже, как минимум, 20 лет, однако до полной ясности еще очень далеко. Более того, разные авторы, на наш взгляд, вообще вкладывают в понятие g -фактора электрона в квантовой точке различный смысл¹, что чрезвычайно затрудняет интерпретацию расчетных и экспериментальных данных.

Ярким примером такого рода может служить крайне непоследовательное отношение к методу квантовомеханического усреднения при расчете фактора Ланде в гетероструктурах. Как известно, метод усреднения является стандартным способом определения характеристик квантовой системы в смешанном состоянии и непосредственно следует из принципа суперпозиции – “краеугольного камня” квантовой механики [4]. Применительно к

квантовым точкам это означает, что эффективное значение g -фактора электрона, локализованного на квантовой точке, определяется по простой формуле [5]

$$g^* = w_1 g_1 + w_2 g_2, \quad (1)$$

где $g_{1(2)}$ – объемное значение фактора Ланде в материале квантовой точки (окружающей матрицы или барьера), $w_{1(2)}$ – вероятность обнаружения электрона в данном материале (определяется интегрированием квадрата модуля волновой функции по соответствующим объемам). В работе [6] была высказана критика в отношении авторов статей [7, 8] за использование ими “принципа среды”, приводящего к формулам типа (1). Суть принципа в том, что всем характеристикам среды (и, в частности, g -фактору) приписывают их объемные значения. Если к материалу барьера это явно применимо, то в отношении материала точки вызывает серьезные сомнения. Аргументы авторов [6], на первый взгляд, представляются весьма серьезными. Численные расчеты (причем подтвержденные экспериментом) дают для g^* в сферических точках InAs/GaAs малых размеров положительные значения ~ 1 , в то время как оба объемных значения $g_{1(2)}$ отрицательны ($g_1 = -14.5$; $g_2 = -0.45$). Ясно, что формула типа (1) объяснить это не способна.

¹ Далее везде речь идет об одноэлектронном состоянии в окрестности дна зоны проводимости материала барьера (матрицы, окружающей квантовую точку). Тензорная природа g -фактора и эффективной массы, а также влияние граничных механических напряжений в данной статье не обсуждается, соответствующие модификации скалярных уравнений, приведенных ниже, довольно очевидны.

Авторы называют это “artificial atom effects” (атомоподобный артефакт) – следствие “явления гашения углового момента”, имея в виду, что в самой квантовой точке $g_1 \sim 2$, подобно изолированному атому.

Однако в более поздней работе [5] с участием тех же авторов вновь упоминается метод усреднения и формулы типа (1). Здесь рассматриваются цилиндрические квантовые точки в гетероструктуре InAs/InP, так что $g_2 = 1.26 > 0$ [9]. При этом эффективные значения фактора Ланде даже для минимальных из рассмотренных точек (высотой ~ 2 нм и радиусом 7 нм) отрицательны. Примечательно, что усреднение (пусть даже более сложно характера, чем (1)) по отрицательным “составляющим” может привести к положительному g -фактору, а по компонентам с разными знаками дает чисто отрицательные значения. Чем обусловлены столь драматические отличия полученных в [6] данных от результатов и выводов работы [5] – зонной структурой материала барьера, формой точек или иными причинами – авторы практически не обсуждают. На наш взгляд, именно эти вопросы заслуживают первостепенного внимания, ибо от них зависит возможность управления спиновой степенью свободы в квантовых точках.

Основная цель данной работы – предложить модель для расчета фактора Ланде (и необходимой для этого “внутренней” эффективной массы) в квантовых точках очень малых размеров. По сути, для этого необходима трансформация известной модели Кейна [10–12] применительно к ситуации размерного квантования. Прежде всего нас будут интересовать так называемые идеальные квантовые точки [13], т.е. 0D-гетероструктуры столь малых размеров, что они способны локализовать только один электрон. Именно такие объекты явились бы наиболее подходящими прототипами кубитов.

Считается, что в объемных полупроводниках эффективное значение g -фактора адекватно описывает известная (\vec{k}, \vec{p}) – теория Кейна. Объект ее исследования – восьмикомпонентный “тетраспинор”, в котором два компонента соответствуют S -состоянию электрона на дне зоны проводимости (с минимумом в центре простой бриллюэновской зоны при $\vec{k} = 0$), и шесть – дырочным P -состояниям (также с максимумом в валентной зоне при $\vec{k} = 0$). Два из этих шести состояний описывают тяжелые дырки, два – легкие дырки, вырожденные с тяжелыми в точке $\vec{k} = 0$ (точка касания дисперсионных кривых), и еще два – также легкие дырки, энергия которых отщеплена от максимума валентной зоны на величину энергии спин-орбитального взаимодействия $-\Delta$. В определенном смысле это эквивалентно обычной релятивист-

ской теории биспиноров Дирака, но с гораздо более сложной структурой энергетических уровней античастиц [14]. Такое совместное рассмотрение частиц и античастиц (точнее, электронных состояний в валентной зоне и зоне проводимости) требуется при малой ширине запрещенной зоны ϵ_g , когда состояние электрона на дне зоны проводимости ошутимо (по расчетам [5], примерно на 12%) перемешивается с дырочными состояниями. В результате (\vec{k}, \vec{p}) -взаимодействие, т.е. члены в гамильтониане, пропорциональные скалярному произведению блоховского квазиимпульса \vec{k} и обычного “атомного” импульса \vec{p} , в сочетании со спин-орбитальным взаимодействием², приводит к перенормировке масс и g -факторов квазичастиц³. Вклад в него дают, вообще говоря, все зоны. Однако в стандартной теории Кейна точно учитывают только вклад ближайших зон в первом порядке по (\vec{k}, \vec{p}) -членам, рассматривая вклад дальних зон как небольшой подгоночный параметр. Для эффективной массы электрона в окрестности дна зоны проводимости m^* и фактора Ланде в объемном полупроводнике эта теория дает соответственно⁴ уравнения

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{E_p(3\epsilon_g + 2\Delta)}{3\epsilon_g(\epsilon_g + \Delta)}, \quad (2)$$

$$g = 2 - \frac{2E_p\Delta}{3\epsilon_g(\epsilon_g + \Delta)} \quad (3)$$

(см., например, [5, 10, 12]). В выражениях (2) и (3) m – масса свободного электрона, $g_0 \approx 2$ – его фактор магнитного расщепления без учета аномального магнитного момента, а E_p – энергия Кейна, пропорциональная квадрату межзонного матричного элемента импульса $\langle S | \hat{p}_z | Z \rangle$ между упоминаемыми выше состояниями электрона в зоне проводимости и в валентной зоне.

От полного восьмикомпонентного уравнения Шредингера с гамильтонианом Кейна можно отделить одно спинорное уравнение [7, 16] для огибающей (по блоховским экспонентам) волновой функции электронного состояния на дне зоны проводимости, содержащее приведенные выше перенормированные значения эффективной мас-

² Оно практически равно внутриатомному, кристалл его лишь немного корректирует [12].

³ В квантовой электродинамике это аналогично перенормировке массы и магнитного момента электрона за счет взаимодействия с электромагнитным полем [15].

⁴ Вкладом в g -фактор аномального магнитного момента свободного электрона, как и вкладом далеких зон, мы здесь пренебрегаем ввиду их малости на фоне рассматриваемых величин.

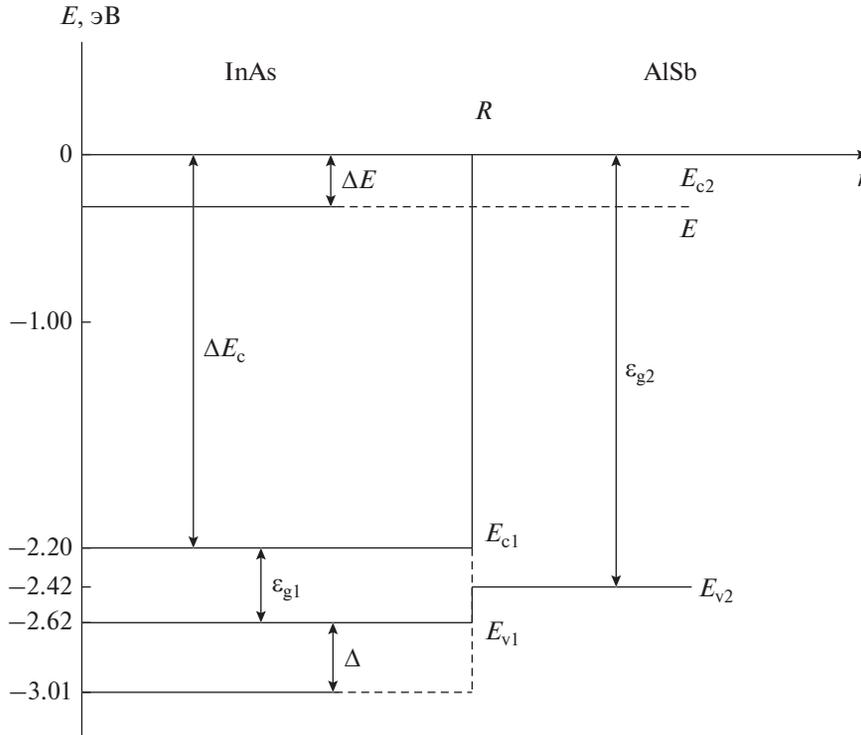


Рис. 1. Зонная структура в окрестности сферических квантовых точек InAs/AlSb: R – радиус квантовой точки, E_{c1} и E_{c2} – дно зоны проводимости в InAs и AlSb соответственно, E_{v1} и E_{v2} – потолок валентной зоны в тех же материалах, $E < 0$ – энергия локализованного на квантовой точке электрона, $\Delta E > 0$ – энергия связи этого электрона, $\epsilon_{g1} = 0.42$ эВ и $\epsilon_{g2} = 2.2$ эВ – энергия запрещенной зоны в InAs и AlSb соответственно, $\Delta E_c = 2.2$ эВ – скачок энергии зоны проводимости на гетерогранице, $\Delta = 0.39$ эВ – энергия спин-орбитального взаимодействия. Так как $E_{c2} > E_{c1}$, $E_{v2} > E_{v1}$, имеем гетероструктуру ковариантного типа.

сы и g -фактора. В магнитном поле оно примет вид [12, 17, 18]

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \Delta f - i\mu_B B \frac{m}{m_2^*} \left(x \frac{\partial f}{\partial y} - y \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m_2^*} (x^2 + y^2) f = \left(E \pm \frac{g_2}{2} \mu_B B \right) f, \quad r \geq R, \quad (4)$$

где $f(r)$ – пространственная часть огибающей спинорной волновой функции $\psi(r) = f(r)u_{1/2}$, μ_B – магнетон Бора (для магнитного поля выбрана симметричная калибровка), e – модуль заряда электрона, m_2^* и g_2 – эффективная масса и фактор Ланде в материале барьера. Верхний знак в правой части (4) соответствует ориентации спина электрона параллельно полю, нижний – антипараллельно. Три оставшихся спинорных уравнения для дырочных состояний нас пока интересовать не будут, так как везде далее рассматривается ковариантный тип зонной структуры (рис. 1), в котором локализация дырок невозможна.

Все изложенное относится к объемным полупроводникам. Ясно, что соотношения (2)–(4) необходимо трансформировать при переходе к гете-

роструктурам типа малых квантовых точек, когда существенным становится размерное квантование. Основной результат статьи – два описанных далее шага такой трансформации.

1. Необходимо четко определить понятие эффективного фактора Ланде для электрона g^* , локализованного на квантовой точке. Рассмотрим квантовые точки InAs в матрице AlSb; соответствующая ковариантная зонная структура показана на рис. 1, а ее характеристики приведены в работах [19, 20]. Энергию связи электрона, входящую в (4), будем отсчитывать, как обычно, от дна зоны проводимости материала барьера в отсутствие магнитного поля; естественно $E < 0$. При включении внешнего магнитного поля этот уровень, во-первых, поднимается по энергии вслед за первым уровнем Ландау, и, во-вторых, расщепляется за счет эффекта Зеемана. В результате зависимость *абсолютного значения* энергии локализованного электрона от магнитного поля имеет вид [21, 22]

$$E_{\pm}(B) = E + \mu_B B \left(\frac{m}{m_1^*(R)} \pm \frac{g_1(R)}{2} \right), \quad (5)$$

причем первый член в скобках соответствует минимуму подзоны Ландау, формирующейся на каждом изолированном уровне в магнитном поле, а второй — энергии взаимодействия спина с внешним полем; $m_1^*(R)$ и $g_1(R)$ — соответственно эффективная масса и фактор Ланде в материале квантовой точки. Чтобы подчеркнуть их отличие от объемных значений, мы явно ввели аргумент R — радиус сферической квантовой точки. Легко видеть, что для свободного электрона уровень со спином против поля “неподвижен” по энергии [23–25].

Однако энергия связи — это *разность* энергии дна зоны проводимости матрицы и абсолютного значения энергии электрона (5):

$$\Delta E_{\pm} = E_{c2\pm} - E_{\pm}.$$

Очевидно, именно эта разность и проявляется в эксперименте. Но энергия дна зоны проводимости также трансформируется в магнитном поле, причем коэффициенты этой зависимости определяются эффективной массой и g -фактором материала барьера⁵

$$E_{c2\pm}(B) = \mu_B B \left(\frac{m}{m_2^*} \pm \frac{g_2}{2} \right). \quad (6)$$

Теперь ясно, что эффективное значение фактора Ланде для локализованного на квантовой точке электрона определяется из соотношения

$$\Delta E_- - \Delta E_+ = g^* \mu_B B, \quad (7)$$

причем знак здесь выбран таким образом, чтобы более устойчивое состояние с большей энергией связи соответствовало при положительном g^* направлению спина против магнитного поля, как для свободных электронов [4]. В результате из соотношений (5)–(7) легко видеть, что эффективное значение g^* -фактора связанного электрона имеет разностную структуру:

$$g^* = g_1(R) - g_2. \quad (8)$$

Обратим внимание на принципиальный момент — даже в пределе точек большого радиуса, когда внутреннее значение фактора Ланде g_1 должно стремиться к объемному значению в соответствующей среде, эффективный g^* -фактор не перестает зависеть от значения g_2 в материале барьера. Этим наше определение принципиально отличается от целого ряда работ (см., например, [6, 16]). Исчезновение зависимости g^* -фактора от материала барьера для точек большого радиуса считается чуть ли не “общим местом”, но, на наш взгляд, не вполне корректно. Кроме того, опреде-

ление (8) естественным образом разрешает кажущийся парадокс результатов работ [5] и [6]: отрицательное значение g_2 , как в GaAs, “работает” на положительное значение g^* , и, напротив, положительное значение g_2 , как в InP, уменьшает эффективное значение g^* . Как видим, для объяснения этого нет необходимости придумывать новые эффекты типа “гашения углового момента” [6]. Отметим также, что использование метода усреднения и формул типа (1) для расчета g^* , по нашему мнению, не имеет физического смысла, поскольку состояние локализованного на квантовой точке электрона вообще не является смешанным.

2. Второй принципиальный вопрос, без ответа на который невозможно решить поставленную задачу — как формируются внутренние характеристики квантовой точки малых размеров, когда расстояния между энергетическими уровнями в ней сравнимы с величиной запрещенной зоны. Другими словами, необходимо получить явную зависимость $m_1^*(R)$ и $g_1(R)$, трансформировав общепринятую модель Кейна. Фактически вопрос стоит даже шире — начиная с каких размеров квантовую точку можно считать “кусочком” среды с присущими ей характеристиками.

Ответ, на наш взгляд, состоит в следующем. Наиболее осязаемое влияние на перенормировку массы и фактора Ланде в материале точки оказывает ширина запрещенной зоны ϵ_{g1} . Энергию спин-орбитального расщепления, как уже отмечалось, определяют в основном внутриатомные взаимодействия, а энергия Кейна гораздо больше энергетических щелей зонной структуры и определяется в основном симметрией электронных и дырочных состояний [12]. Таким образом, в объемном полупроводнике m_1^* и g_1 определяются в основном энергетической щелью между наивысшим дырочным уровнем (четырекратно вырожденным в данного типа структурах) и наименьшим электронным (двукратно вырожденным по спину). Как видно из рис. 1, энергетическая щель в ковариантной структуре между максимальным дырочным и минимальным электронным уровнем становится равной

$$\epsilon_{g1} \rightarrow \epsilon_{g1} + E_{c2} - E = \epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E,$$

где ΔE_c — скачок энергии дна зоны проводимости на гетерогранице (глубина прямоугольной потенциальной ямы для электронов), ΔE — энергия связи электрона в основном состоянии в квантовой точке. Именно величина, определяемая приведенной выше формулой, играет роль щели между ближайшими зонами в малой квантовой точке.

Таким образом, простейшая, на наш взгляд, модификация теории Кейна применительно к

⁵ Напомним, что в отсутствие магнитного поля эта энергия обычно принимается за нуль, что несколько “маскирует” ее роль в энергии связи.

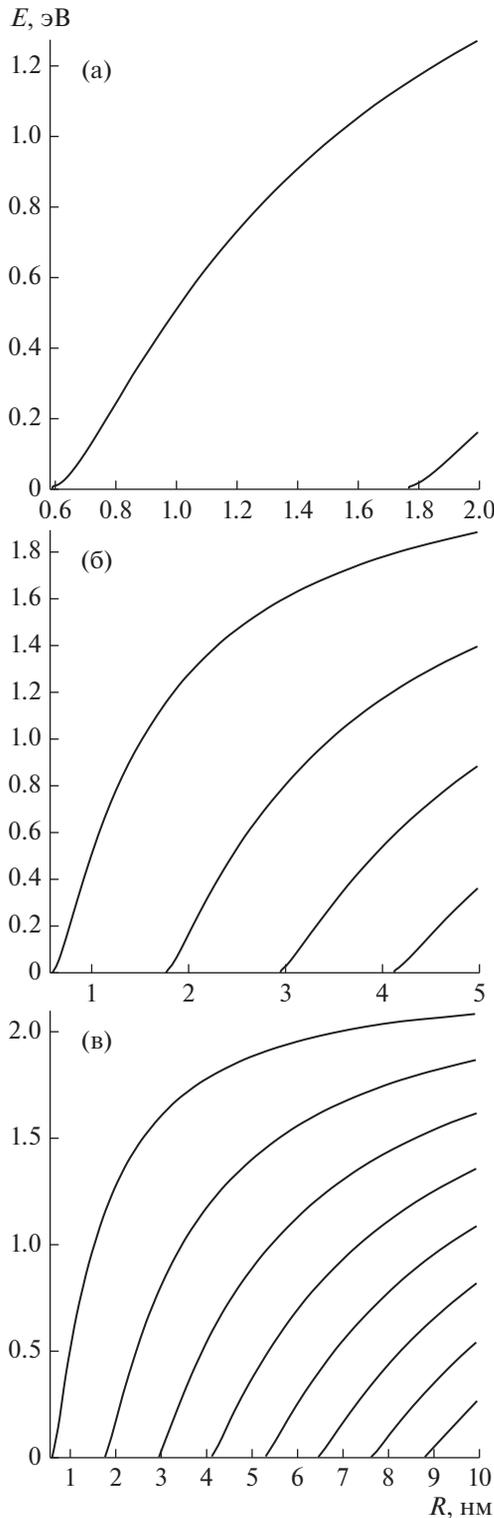


Рис. 2. Поведение энергии связи электронов ΔE (эВ) по мере роста радиуса сферических квантовых точек R (а)–(в) в структуре InAs/AlSb. Верхняя кривая на всех рисунках – основное состояние $1S$, двукратно вырожденное по спину, нижние – возбужденные состояния с кратностью вырождения $2n^2$ (n – номер уровня сверху вниз по рисунку), характерной для сферической симметрии. Рисунки различаются только диапазоном изменения R . На рис. (а) хорошо просматривается диапазон идеальности квантовой точки $0.61 \leq R \leq 1.83$ нм.

сферическим квантовым точкам дает вместо соотношений (2) и (3) соответственно⁶

$$\frac{m}{m_1^*(R)} =$$

$$= 1 + \frac{E_p [3(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E) + 2\Delta]}{3(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E)(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E + \Delta)}, \quad (9)$$

$$g_1(R) =$$

$$= 2 - \frac{2E_p\Delta}{3(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E)(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E + \Delta)}. \quad (10)$$

Удобнее исключить из этих выражений энергию Кейна, определив $m_1^*(R)$ и $g_1(R)$ через их хорошо проверенные и табулированные объемные значения m_1^* и g_1 . Таким образом, окончательно получаем для перенормированных “внутренних” значений эффективной массы и фактора Ланде следующие выражения:

$$\frac{m}{m_1^*(R)} = 1 + \left(\frac{m}{m_1^*} - 1 \right) \times$$

$$\times \frac{[3(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E) + 2\Delta]\epsilon_{g1}(\epsilon_{g1} + \Delta)}{(3\epsilon_{g1} + 2\Delta)(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E)(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E + \Delta)}, \quad (11)$$

$$g_1(R) = 2 + (g_1 - 2) \times$$

$$\times \frac{\epsilon_{g1}(\epsilon_{g1} + \Delta)}{(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E)(\epsilon_{g1} + \Delta E_c - \Delta E + \Delta)}. \quad (12)$$

Теперь легко видеть, что эти значения стремятся к своим объемным пределам, когда энергия основного состояния приближается к дну зоны проводимости материала квантовой точки. Именно при условии

$$\Delta E \approx \Delta E_c \quad (13)$$

квантовая точка становится “малым кусочком” соответствующего материала. Ясно, что при этом квантовая точка довольно плотно заполнится связанными уровнями, на которых магнитное поле “достроит” подзоны Ландау. Рис. 2 иллюстрирует, как это происходит для сферической квантовой точки InAs/AlSb (детали расчетов приведены ниже). Ясно, что кратность вырождения уровней растет по обычным правилам, характерным для сферически симметричной ситуации.

Нас, однако, прежде всего интересует обратный случай, когда точка способна локализовать не более одного электрона. Ковариантность зонной структуры необходима для того, чтобы исключить возможность локализации дырок. Такие точ-

⁶ Любопытно, что формулы (9), (10) с точностью до обозначений совпадают с аналогичными выражениями работы [16], но выводы относительно эффективного значения g^* -фактора и роли g_2 в нем мы делаем совершенно различные.

ки, как уже отмечалось, называют идеальными [13], и именно они наиболее интересны как прототипы кубитов. Из (11), (12) видно, что эффективная масса и фактор Ланде зависят от энергии уровня. В то же время энергия связи, в свою очередь, определяется эффективной массой электронов. Таким образом, получается самосогласованная задача расчета энергии основного состояния. Уравнение для огибающей волновой функции электрона внутри квантовой точки, дополняющее (4), имеет вид [17, 18, 22]

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m_1^*(R)} \Delta f - i\mu_B B \frac{m}{m_1^*(R)} \left(x \frac{\partial f}{\partial y} - y \frac{\partial f}{\partial x} \right) + \\ & + \frac{e^2 B^2}{8m_1^*(R)} (x^2 + y^2) f - \Delta E_c f = \quad (14) \\ & = \left(E \pm \frac{g_1(R)}{2} \mu_B B \right) f, \quad r \leq R, \end{aligned}$$

причем параметры $m_1^*(R)$ и $g_1(R)$ определяются согласно (11), (12), ΔE_c – глубина локализующей электрон прямоугольной потенциальной ямы (рис. 1).

Аналитические решения системы (4), (14), построенные на основе функций Грина, достаточно хорошо известны [17, 18, 26]:

$$f(r) \approx \frac{N'}{r} \exp \left(-xy \frac{ieB}{2\hbar} - \frac{\sqrt{2m_2^* \Delta E}}{\hbar} r \right), \quad r \geq R; \quad (15)$$

$$\begin{aligned} & f(r) \approx \frac{N''}{r} \exp \left(-xy \frac{ieB}{2\hbar} \right) \times \\ & \times \sin \left(\sqrt{2m_1^*(R)} [\Delta E_c - \Delta E] \frac{r}{\hbar} \right), \quad r \leq R, \quad (16) \end{aligned}$$

причем энергия связи ΔE и скачок на гетерогранице ΔE_c , строго говоря, зависят от магнитного поля и спина в соответствии с (5), (6); N' и N'' – не интересующие нас нормировочные постоянные. Для того, чтобы приведенные решения работали, необходимо выполнение двух условий.

Во-первых, магнитное поле должно быть достаточно слабым, чтобы не проявлялся его “квантовый характер” [4]. Точнее, энергетическая щель между уровнями Ландау должна быть много меньше глубины потенциальной ямы

$$\hbar\omega_H = 2\mu_B B \frac{m}{m_1^*(R)} \ll \Delta E_c, \quad (17)$$

где ω_H – циклотронная частота. Тогда от суммирования по уровням Ландау можно перейти к интегрированию при расчетах электронной плотности [21].

Во-вторых, радиус квантовой точки и энергия связи должны удовлетворять следующему соотношению, гарантирующему малость отклонений от сферической симметрии распределения плотности локализованного электрона [17, 21, 22, 26]:

$$eBR / \sqrt{2m_2^* \Delta E} = R/R_c < 1. \quad (18)$$

Поскольку этот критерий гораздо менее очевиден, чем первый, остановимся на нем подробнее. Как известно, волновые функции, соответствующие отдельным уровням Ландау, обладают цилиндрической симметрией. Поэтому чуть ли не главная трудность решения уравнений Шредингера (или Паули) в сферически-симметричных потенциалах при наличии магнитного поля – необходимость работать с рядами (чаще всего квадратичными) по полиномам Эрмита или Лагерра. Как раз в практически важном случае слабого магнитного поля они сходятся хуже всего, что иногда приводит к неадекватным результатам (например, [12]). К сожалению, такого рода “конфликт симметрий” весьма распространен в подобных задачах⁷. В то же время использование интегрального представления функций Грина в магнитном поле позволяет избежать таких трудностей. В работе [21] подробно прослежено, как в притягивающем дельта-потенциале наложение цилиндрически симметричных мод Ландау формирует *сферическую* симметрию в окрестности точки сосредоточения потенциала. Роль дельта-потенциала здесь сводится к тому, чтобы снять случайное вырождение по координатам центров орбит, характерное для свободных замагниченных электронов, и “собрать” эти центры в одной точке. Ту же роль играет и потенциальная яма конечных размеров. В результате электронное облако имеет сферическую симметрию в окрестности центра, которая постепенно переходит в осевую симметрию вдали от него; ось такой симметрии – линия индукции, проходящая через центр. Характерное расстояние от центра, на котором сохраняется сферическая симметрия, задает величина

$$R_c = \sqrt{2m_2^* \Delta E} / eB. \quad (19)$$

Это не что иное, как аналитическое продолжение в область отрицательных энергий классического выражения для циклотронного радиуса частицы с кинетической энергией, равной ΔE .

Таким образом, критерий (18) применимости решений (15), (16) сводится к требованию, чтобы

⁷ Часто во избежание подобных трудностей притягивающий потенциал квантовой точки берут параболическим, типа потенциала гармонического осциллятора (см., например, [27, 28]). Это позволяет “вписаться” в симметрию магнитного поля, но в рассматриваемой нами ситуации с малыми квантовыми точками абсолютно бесполезно в связи с полным конфайнментом электронов в таком потенциале.

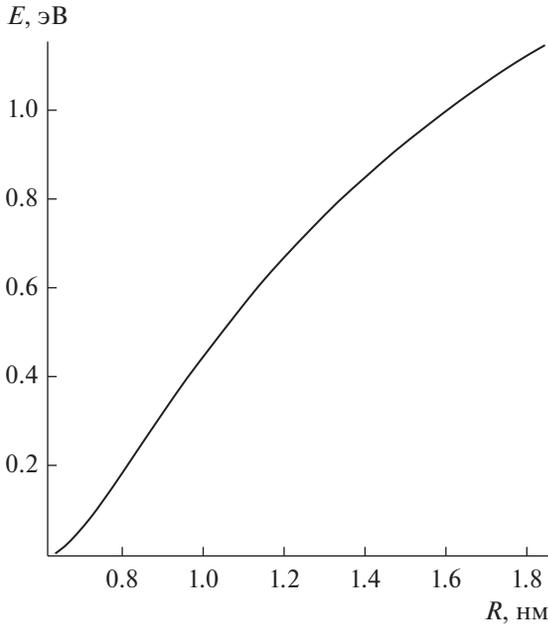


Рис. 3. Зависимость энергии связи ΔE (эВ) единственного электронного уровня, локализованного на идеальной квантовой точке InAs/AlSb, от ее радиуса R в диапазоне идеальности точки.

вся квантовая точка лежала в области сферической симметрии электронной плотности. Обратим внимание — он заведомо выполняется при любом, сколь угодно малом отделенном от нуля ΔE и $B \rightarrow 0$ и, напротив, заведомо нарушается при любом, сколь угодно малом отделенном от нуля B и $\Delta E \rightarrow 0$. Именно эта тонкость определяет правильную процедуру выключения внешнего магнитного поля, т.е. предельного перехода $B \rightarrow 0$.

Энергия связи с помощью решений (15), (16) определяется из условия непрерывности логарифмической производной на гетерогранице [4, 29]:

$$\frac{1}{f(R-0)} \frac{\partial f(R-0)}{\partial r} = \frac{1}{f(R+0)} \frac{\partial f(R+0)}{\partial r}.$$

В результате получаем трансцендентное уравнение [17, 18]

$$\begin{aligned} \operatorname{ctg} \left[\sqrt{2m_1^*(R)[\Delta E_c - \Delta E]} \frac{R}{\hbar} \right] = \\ = - \sqrt{\frac{m_2^* \Delta E}{m_1^*(R)[\Delta E_c - \Delta E]}}, \end{aligned} \quad (20)$$

которое в совокупности с соотношениями (5), (6), (8), (11) и (12) позволяет замкнуть систему уравнений для нашей многопараметрической задачи.

Чтобы проследить поведение внутренней массы (11) и эффективного g -фактора (8), не отвлекаясь на нелинейные эффекты, будем решать уравнение (20) в пределе $B = 0$. Собственно, это в чистом виде соответствует определению фактора Ланде как коэффициента, характеризующего величину зеемановского расщепления в первом порядке теории возмущений по магнитному полю. Нелинейные эффекты в подобных задачах, несомненно, заслуживают отдельного исследования, причем условия выполнения критерия (18) делают их весьма нетривиальными.

Приведенные ниже расчеты выполнены для гетероструктуры InAs/AlSb со следующими параметрами [19], [20]: $m_1^* = 0.023m$, $m_2^* = 0.14m$, $g_1 = -14.8$, $g_2 = 1.9$, $\Delta E_c = 2.2$ эВ, $\epsilon_{g1} = 0.42$ эВ, $\epsilon_{g2} = 2.42$ эВ, $\Delta = 0.39$ эВ. На рис. 3 показано поведение энергии связи ΔE от радиуса R во всем “диапазоне идеальности”, т.е. в пределах таких значений радиусов, когда точка локализует только один электрон. Диапазон этот простирается от значения

$$R_{\min} = \pi \hbar / \sqrt{2m_1^*(R_{\min}) \Delta E_c} \approx 0.61 \text{ нм},$$

при котором в сферической квантовой точке появляется первый связанный уровень, до величины $3R_{\min} \approx 1.83$ нм, при которой появляется второй связанный уровень ([17, 18, 22] и рис. 2а). Видно, что энергия связи растет довольно быстро, так что область выполнения критерия (18) для не слишком сильных лабораторных магнитных полей начинается практически сразу при превышении R_{\min} .

Следует отметить, что на рис. 2 можно проследить “динамику формирования” в квантовой точке зонной структуры, характерной для объемного полупроводника, по мере роста ее размеров. Эти расчеты выполнены для той же гетероструктуры InAs/AlSb. Ввиду сферической симметрии задачи nS -уровни, показанные на рисунке, по характеру вырождения аналогичны кулоновским. Другими словами, при фиксированном значении R уровень с номером n , считая по рисунку “сверху вниз”, вырожден с учетом спина $2n^2$ -кратно. Кроме того, магнитное поле создает на каждом уровне свою подзону Ландау. Нам представляется поэтому весьма “загадочной” аргументация авторов [6], объясняющих близость g -фактора локализованных электронов к значению ≈ 2 , характерному для свободных электронов, тем, что энергия зеемановского расщепления составляет $\sim \hbar \omega_H / (E_n - E_{n+1})$; это, по их мнению, обуславливает малость орбитального момента. Из рис. 2 видно, что условие (13) начинает выполняться в районе $R \sim 10$ нм; именно при таких примерно размерах квантовая точка согласно модели (11), (12), (20) становится “кусоч-

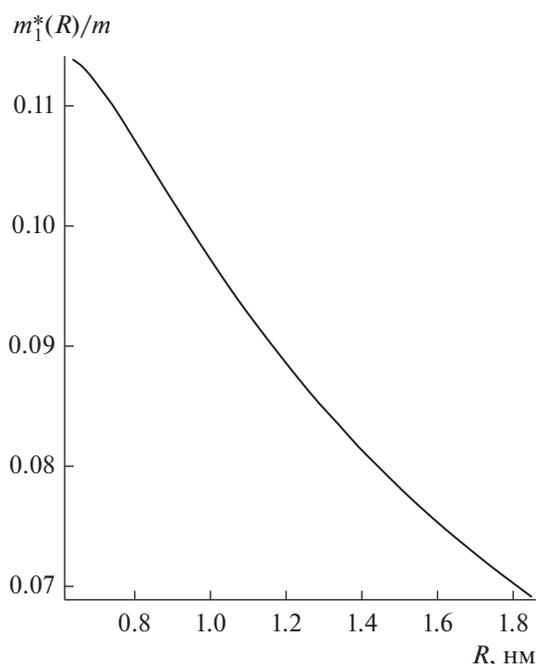


Рис. 4. Зависимость эффективной массы электрона $m_1^*(R)$, локализованного на идеальной квантовой точке InAs/AlSb, в единицах массы свободного электрона, от радиуса точки R в диапазоне идеальности точки.

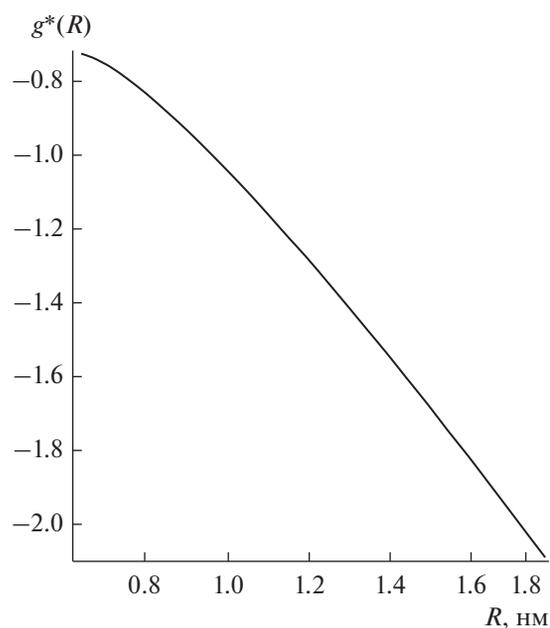


Рис. 5. Зависимость эффективного значения фактора магнитного расщепления g^* , локализованного на идеальной квантовой точке InAs/AlSb, от радиуса точки R в диапазоне идеальности точки (расчет согласно (8)).

ком” полупроводника InAs с присущими ему свойствами.

На рис. 4 показана масса локализованного на точке единственного электрона $m_1^*(R)$ (масса свободного электрона, как и ранее, принята за единицу) в зависимости от радиуса точки, опять-таки во всем диапазоне идеальности $R_{\min} \leq R \leq 3R_{\min}$. Любопытно, что при появлении уровня эффективная масса электрона весьма близка к массе легких дырок, отщепленных спин-орбитальным взаимодействием $m_{\text{SO}}^* \approx 0.14m$ [19]. Затем она довольно быстро падает с ростом радиуса, приближаясь к своему объемному значению $m_1^* = 0.023m$ при $R \sim 10$ нм. В диапазоне идеальности точки она меняется примерно в 1.5 раза.

Поведение главного объекта нашего исследования — эффективного фактора Ланде — иллюстрирует рис. 5. Как видно, в данной гетероструктуре g^* -фактор сразу начинается с отрицательных значений. Из (8) легко видеть, что это обусловлено прежде всего значением g_2 в материале барьера. В диапазоне идеальности квантовой точки он меняется почти в три раза. Объемное значение

$$g^* = g_1 - g_2 \approx -14.8 - 1.9 = -16.7$$

достигается при том же примерно (или несколько большем) значении радиуса точки $R \sim 10$ нм. Яс-

но, что такой значительный интервал изменений наряду с чувствительностью к внешним воздействиям делает фактор Ланде чрезвычайно привлекательным объектом для изучения свойств полупроводниковых гетероструктур, с одной стороны, и для внешнего управления спиновой степенью свободы, с другой.

В заключение кратко сформулируем основные результаты работы, относящиеся к механизму формирования фактора Ланде. Во-первых, его эффективное значение имеет структуру разности двух величин, первая из которых определяется материалом, формой и размерами квантовой точки, а вторая (вычитаемое) — только материалом барьера. Зависимость от последнего не пропадает даже для больших квантовых точек. Во-вторых, внутренние значения g^* -фактора (как и эффективной массы) электрона, локализованного на квантовой точке, определяются прежде всего энергией его основного состояния. Они сходятся к объемным значениям в материале точки, когда эта энергия связи приближается к дну зоны проводимости в материале точки. В-третьих, для конкретной ковариантной гетероструктуры InAs/AlSb рассчитаны характеристики, при которых такая квантовая точка локализует не более одного электрона, не локализуя при этом дырок, и потому может служить прототипом твердотельного кубита.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 17-07-00380), а также Министерства образования и науки Российской Федерации (грант 3.6634.2017/6.7).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ивченко Е.Л.* // Успехи физ. наук. 2012. Т. 182. № 8. С. 869.
2. *Spin Physics in Semiconductors* / Ed. Dyakonov M.I. Berlin: Springer, 2008.
3. *Курсаев Ю.Г.* // Успехи физ. наук. 2010. Т. 180. № 7. С. 759.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
5. *Van Bree J., Silov A.Yu., Koenraad P.M. et al.* // Phys. Rev. B. 2012. V. 85. P. 165323.
6. *Pryor C.E., Flatte M.E.* // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 96. № 2. P. 026804.
7. *Kiselev A.A., Ivchenko E.L., Rossler U.* // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 16353.
8. *Rodina A.V., Efros Al.L., Alekseev A.Yu.* // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 155312.
9. *Weisbuch C., Hermann C.* // Sol. St. Commun. 1975. V. 16. P. 659.
10. *Kane E.O.* // J. Phys. Solids. 1957. V. 1. P. 249.
11. *Roth L.M., Lax B., Zwerling S.* // Phys. Rev. 1959. V. 114. P. 90.
12. *Ансельм А.И.* Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
13. *Леденцов В.М., Устинов В.М., Шукин В.А. и др.* // ФТП. 1998. Т. 32. С. 385.
14. *Келдыш Л.В.* // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. № 2. С. 364.
15. *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1980.
16. *Ивченко Е.Л., Киселев А.А.* // Письма в ЖЭТФ. 1998. Т. 67. № 1. С. 41.
17. *Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И.* // Оптик. журн. 2015. Т. 82. № 5. С. 3.
18. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И., Шарц А.А.* // РЭ. 2015. Т. 60. № 10. С. 1073.
19. *Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R.* // J. Appl. Phys. 2001. V. 89. P. 5815.
20. *Алешкин В.Я., Гавриленко В.И., Иконников А.В. и др.* // ФТП. 2008. Т. 42. № 7. С. 846.
21. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Теорет. и матем. физика. 2010. Т. 164. № 1. С. 157.
22. *Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И.* // Электромагн. волны и электрон. системы. 2014. № 6. С. 67.
23. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Письма в ЖЭТФ. 2002. Т. 75. № 8. С. 435.
24. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Докл. АН СССР. 2002. Т. 386. № 6. С. 753.
25. *Родионов В.Н., Кравцова Г.А., Мандель А.М.* // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 78. № 4. С. 253.
26. *Григорьев С.Н., Мандель А.М., Ошурко В.Б., Соломахо Г.И.* // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 37. № 24. С. 74.
27. *Капуткина Н.Е., Лозовик Ю.Е.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. V. 18. P. 2169.
28. *Puente A., Pons M., Nazmitdinov R.G.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2010. V. 248. P. 012017.
29. *Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1966.