ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н.И. ЛОБАЧЕВСКОГО»

На правах рукописи

Хомицкий Денис Владимирович

СПИНОВАЯ ДИНАМИКА В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ А(3)В(5) И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ

1.3.11 – Физика полупроводников

Диссертация на соискание учёной степени доктора физико-математических наук

> Нижний Новгород 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение
Глава 1. Некоторые задачи полупроводниковой спинтроники и физики
топологических изоляторов (литературный обзор)
1.1. Спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых структурах25
1.1.1. Введение
1.1.2. Вклад Дрессельхауза
1.1.3. Вклад Рашбы
1.1.4. Спектр и спиновая поляризация при наличии СОВ
1.1.5. Спиновая прецессия вдоль траектории при наличии СОВ
1.2. Квантовые точки со СОВ и электрический дипольный спиновый резонанс31
1.2.1. СОВ и электрический дипольный спиновый резонанс
1.2.2. Эффекты интерференции Ландау-Зенера-Штюкельберга-Майораны
при туннелировании в квантовых точках
1.2.3. Эксперименты по ЭДСР и туннелированию в квантовых точках
1.3. Сверхрешётки со СОВ и оптическая генерация спиновой плотности
1.4. Решётка из атомов висмута на подложке из кремния как структура с
гигантским СОВ54
1.5. Оптические свойства квантовых ям с монослоем магнитных примесей
вблизи ямы
1.6. Топологические изоляторы
1.6.1. Модель BHZ
1.6.2. Краевые состояния в модели BHZ
1.6.3. Экспериментальные результаты для краевых состояний
в двумерных ТИ71
1.6.4. Топологические свойства состояний в ТИ77
1.6.5. Некоторые свойства краевых состояний в трёхмерных ТИ 80
1.6.6. ТИ с магнитными структурами и квантовые точки в ТИ
1.6.7. Прохождение дираковских состояний через потенциальные барьеры95

Глава 2. Квантовые точки со СОВ в переменном электрическом поле
2.1. Квазиклассическая динамика координаты и спина в двойной квантовой
точке со слабо проницаемым барьером100
2.1.1. Модель и уравнения квазиклассической динамики102
2.1.2. Результаты для эволюции координаты и спина103
2.2. Эволюция вероятности туннелирования и спина в двойной квантовой
точке в импульсном электрическом поле108
2.2.1. Квантовые состояния и наблюдаемые величины108
2.2.2. Эволюция в импульсном электрическом поле
2.3. Динамика туннелирования и спина в периодическом электрическом
поле: очень медленные осцилляции Раби118
2.3.1. Эволюция на малых временах
2.3.2. Теория Флоке
2.3.3. Стробоскопическая динамика на больших временах
2.4. Динамика координаты и спина в квантовом биллиарде со СОВ126
2.4.1. Модель и статистические параметры эволюции128
2.4.2. Результаты для динамики плотностей вероятности, спиновой
проекции и их коррелятора130
2.5. Динамика в двойной КТ под действием импульса специальной
формы134
2.5.1. Методы квантовой теории оптимального управления (QOCT)134
2.5.2. Результаты QOCT для динамики в двойной КТ135
2.6. Эволюция под действием периодического поля в одиночной КТ
в нанопроволоке с учётом состояний континуума142
2.6.1. Состояния дискретного и непрерывного спектра для мелкого
донора в нанопроволоке в магнитном поле с учётом СОВ142
2.6.2. Результаты расчёта динамики в периодическом поле
с учётом состояний континуума148
2.6.3. Динамика состояний в глубокой квантовой яме
с несколькими уровнями с учётом континуума153

2.6.4. Сравнение численных и аналитических результатов по ионизации
электрона из квантовой ямы со многими уровнями164
2.7. Режимы туннелирования, LZSM интерференции, переворота
спина и субгармоник ЭДСР в двойной КТ со СОВ171
2.7.1. Модель и основные параметры171
2.7.2. Режимы эволюции и туннелирования с сохранением
и переворотом спина, рассматриваемые в пространстве
параметров системы178
2.7.3. Туннелирование и переворот спина при «медленной» эволюции
2.7.4. Динамика туннелирования и спина на субгармониках ЭДСР194
Выводы по главе 2
Глава 3. Полупроводниковые сверхрешётки со СОВ, структура с монослоем
Ві на Si и структура с квантовой ямой и монослоем магнитных
примесей211
3.1. Квантовые состояния и спиновая поляризация в сверхрешётках
co COB
3.1.1. Гамильтониан и волновые функции для сверхрешётки
со СОВ Рашбы213
3.1.2. Спектр, спиновая поляризация в зоне Бриллюэна
сверхрешётки и спиновая чётность состояний
3.1.3. Спектр и спиновая поляризация при наличии вкладов Рашбы,
Дрессельхауза и периодической модуляции параметра Рашбы
3.2. Спиновые текстуры при рассеивании на сверхрешётке со СОВ
3.3. Формирование спиновой плотности при воздействии на сверхрешётку
электромагнитного излучения терагерцового диапазона
3.4. Электрический ток, спиновая поляризация и спиновая плотность в
сверхрешётке с СОВ в постоянном электрическом поле
3.5. Квантовые состояния и спиновая поляризация в решётке из монослоя
Ві на подложке Si с гигантским СОВ242

3.6. Модель кинетики фотолюминесценции для квантовой ямы с близко
расположенным монослоем марганца: эффект «спиновой памяти»251
3.6.1. Схема и результаты экспериментов
3.6.2. Кинетическая модель фотолюминесценции и сравнение
с результатами экспериментов258
Выводы по главе 3
Глава 4. Квантовые точки и динамика в топологических изоляторах
с магнитными барьерами. Краевые состояния в монослое висмута на
кремнии
4.1. Модель КТ на крае ТИ в КЯ HgTe/CdTe, образованной
макроскопическими магнитными барьерами
4.1.1. Вывод гамильтониана для состояний в КТ с магнитными барьерами272
4.1.2. Глубина проникновения краевого состояния в барьер
4.1.3. Структура локализованных состояний
4.1.4. Состояния непрерывного спектра
4.2. Структура с двойной КТ, сформированной тремя магнитными
барьерами
4.3. Релаксация энергии в КТ на крае ТИ с участием фононов
4.3.1. Используемые приближения и схема расчёта скорости релаксации300
4.3.2. Расчёт скорости релаксации при низкой температуре
4.3.3. Релаксация в непрерывный спектр при высокой температуре
4.3.4. Выводы по п.4.3
4.4. Время жизни квазистационарных состояний в КТ в ТИ с магнитными
барьерами
4.5. Динамика заселённости и спиновой плотности для состояний дискретного
спектра в КТ в присутствии периодического электрического поля
с учётом состояний континуума316
4.5.1. Модель и основные параметры
4.5.2. Результаты моделирования эволюции заселённостей

4.5.2.1. Эволюция заселённостей	
4.5.2.2. Вероятность ухода в континуум	
4.5.2.3. Эволюция средних значений энергии, спина и координаты	
4.5.3. Распределения плотности в пространстве и плотность тока	
вероятности	
4.5.3.1. Эволюция распределений плотности	
4.5.3.2. Плотность тока вероятности	
4.5.4. Выводы по п.4.5	
4.6. Регулярная и нерегулярная динамика в широкой КТ на крае ТИ со м	иногими
дискретными уровнями в периодическом электрическом поле	
4.6.1. Особенности спектра и начального состояния для эволюции	
4.6.2. Аналитические результаты для квазиклассической динамики	338
4.6.3. Эволюция квантовой системы в методе Флоке и свойства	
квазиэнергетических состояний	343
4.6.4. Эволюция средних значений во времени	346
4.6.5. Эволюция средних значений в присутствии потенциала беспоряди	
4.6.6. Выводы по п. 4.6	352
4.7. Динамика волновых пакетов на поверхности трёхмерных ТИ	
с магнитными барьерами	352
4.7.1. Постановка задачи и гамильтониан	352
4.7.2. Численный расчёт динамики волнового пакета	355
4.7.3. Аналитические результаты для коэффициента прохождения	
в статическом случае	
4.7.4. Выводы по п. 4.7	
4.8. Особенности динамики волновых пакетов и магнитопоглощения пр	И
учёте гексагонального искажения спектра поверхностных краевых	
состояний в Bi ₂ Te ₃	370
4.8.1. Гамильтониан и спектр уровней Ландау	
4.8.2. Циклотронная динамика волновых пакетов	
4.8.3. Влияние гексагонального искажения на коэффициент поглощения	ı376

4.8.4. Выводы по п.4.8	30
4.9. Топологические свойства краевых состояний в электронном газе,	
находящемся в решётке висмута на подложке кремния	60
4.9.1. Модель краевых состояний	31
4.9.2. Топологические свойства объёмных состояний и Z ₂ инвариант	35
Выводы по главе 4	38
Заключение	91
Список основных сокращений и обозначений)5
Список литературы	96
Список основных публикаций автора по теме диссертации42	26

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

За физики последние десятилетия спинтроника часть два как полупроводников, посвящённая управлению и использованию спиновых степеней свободы носителей заряда, превратилась в хорошо развитую область науки, многочисленные результаты которой представлены в обзорах, монографиях и учебных пособиях (см., например, [15], [22], [23], [86], [92], [111], [123], [184], [261], [277]). Характерным признаком задачи спинтроники в большинстве источников является её постановка как задачи об управлении спином с помощью механизмов, включающих внешнее магнитное поле, изменяя которое, можно управлять ориентацией спинов, или, более широко, магнитных моментов частиц. Ещё одним механизмом для управления спином, который связывает орбитальную и спиновую степени свободы, является спин-орбитальное взаимодействие (СОВ), о котором рассказано в ряде монографий и учебных пособий (см., например, [15], [86], [92], [261]). Оно вносит существенный вклад прежде всего в узкозонных полупроводниках, но является заметным и в технологически привычных системах на базе GaAs, InAs, InSb и других. Воздействие на спин от СОВ обусловлено градиентом потенциальной энергии ∇U , т.е. пропорционально электрическому полю, и для частицы со спином 1/2 описывается вкладом в гамильтониан вида

 $H_{SO} = \frac{\lambda_0}{\hbar} \vec{\sigma}[\vec{p}, \nabla U]$, где $\lambda_0 = -\hbar^2/4m_0^2 c^2 = -3.7 \cdot 10^{-8} \text{ нм}^2$, \vec{p} – оператор импульса электрона, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – векторный оператор из матриц Паули второго порядка [4], [15], [261]. Из вида гамильтониана H_{SO} можно сделать вывод, что действие СОВ можно трактовать как проявление эффективного магнитного поля, зависящего от градиента потенциала и волнового вектора.

Для электронных и дырочных состояний существуют различные вклады от СОВ в гамильтониан, обусловленные разным характером зонной структуры и набором определённых элементов симметрии у кристаллического потенциала и макроскопического потенциала гетероструктуры [15], [261]. Основной механизм влияния СОВ состоит в «зацеплении» состояний с различным спином в силу наличия в гамильтониане матриц Паули, что обуславливает возможность переходов между такими состояниями даже под действием электрического поля, что важно для технологических приложений. Естественно, возникает вопрос, насколько эффективным является такой вклад от СОВ по сравнению с другими слагаемыми в гамильтониане задачи, которые, возможно, будет носить конкурирующий характер и ослаблять его действие.

В типичных полупроводниковых структурах обычно рассматривают два вклада от СОВ. Первый из них, проявляющийся при отсутствии центра инверсии в кристаллической решётке, связывают с именем G. Dresselhaus [91] (см. также [15], [261]) и в линейном по квазиимпульсу приближении для двумерного газа в плоскости (xy) для полупроводника со структурой цинковой обманки записывают в виде $H_D = \beta_D(k_x \sigma_x - k_v \sigma_v)$. Второй вклад, появляющийся при отсутствии центра инверсии y макроскопического потенциала В полупроводниковой гетероструктуре, связывают с именем Э. Рашба [35], [8] (см. также [15], [261]) и записывают в форме $H_{\rm R} = \alpha_{\rm R} (k_{\rm v} \sigma_x - k_x \sigma_v)$. Параметры $\beta_{\rm D}$ и $\alpha_{\rm R}$ называют параметрами Рашбы соответственно. В Дрессельхауза И большинстве типичных полупроводниковых гетероструктур на базе GaAs эти параметры составляют 1...5 мэВ·нм, а в более узкозонных полупроводниках на базе, например, InSb, могут составлять 20...30 мэВ·нм [15], [92]. Эти величины означают, что типичное расщепление Δ_{SO} в зонном спектре, обусловленное СОВ, в гетероструктурах с характерным модулем квазиимпульса $k \sim 10^5 \dots 10^6$ см⁻¹ составляет от нескольких десятков мкэВ до нескольких единиц мэВ. Для современной физики и технологии гетероструктур такое расщепление является значимым и экспериментально проявляемым, однако оно требует высокого качества образцов и низких температур (как правило, ниже 1 К) для надёжной верификации его в экспериментах.

Небольшая величина расщепления уровней от СОВ в типичных полупроводниках роднит их с полупроводниковыми сверхрешётками, где масштаб минизон также может исчисляться единицами мэВ [39], [127].

9

Представляет поэтому интерес исследование полупроводниковых сверхрешёток со спин-орбитальным взаимодействием [157], в котором масштаб минизон и расщепление от СОВ являются величинами одного порядка, в том числе квантовых состояний и их спиновой поляризации, транспортных и оптических свойств, а также эффектов от внешнего магнитного поля. Данные задачи составляют содержание одного из разделов (главы 3) настоящей диссертационной работы. Результаты некоторых из оригинальных работ этого раздела [16], [82], [137], [138], [139] частично вошли в учебно-методические пособия [40], [42]. В этом же разделе описывается задача о взаимодействии электромагнитного излучения с носителями заряда и спина в квантовой яме, в непосредственной близости от которой находится монослой магнитных атомов марганца. Мотивированная недавними экспериментами из «классической» спинтроники с магнитными материалами [51], [193], она близко примыкает к методологии диссертационной работы в части управления спиновыми степенями свободы с помощью импульсов электромагнитного поля различной поляризации. Это приводит к нетривиальным динамическим эффектам вида эффекта «спиновой памяти», наблюдавшихся в экспериментах [51], [193], которые могут быть описаны в рамках модели кинетики фотолюминесценции, развитой в задаче, выполненной в рамках данной диссертационной работы [90].

Следует отметить, что в полупроводниковой спинтронике, т.е. в структурах с достаточно сильным СОВ, был открыт ряд новых, привлекающих внимание фундаментальных явлений, таких как спиновая аккумуляция (эффект Рашбы-Эдельштейна) и спиновый эффект Холла (SHE) [86], [92], [132], [184] или спиновые фотогальванические эффекты [92], [128]. Суть явлений из группы спинового эффекта Холла заключается в накоплении на противоположных границах образца, перпендикулярных направлению электрического поля, частиц с противоположной проекцией спина. При этом концентрация заряда на противоположных границах может не изменяться, то есть обычная поперечная холловская разность потенциалов может не фиксироваться. Явления при фотогальванических эффектах взаимодействием спиновых связаны co

электромагнитного излучения с частицами, их токами И спинами в полупроводниковых структурах с СОВ. Возникло целое направление, называемое спиновой фотогальваникой. Были предсказаны и обнаружены циркулярный фотогальванический эффект, спин-гальванический эффект, обратный спингальванический эффект. Достижения в этой области неразрывно связаны с школой отечественной научной физики конденсированного состояния (Е.Л. Ивченко, Ю.Б. Лианда-Геллер, Г.Е. Пикус и другие).

В описанных в предыдущем абзаце задачах роль СОВ напоминает роль передаточного механизма от внешнего источника (постоянное электрическое поле, электромагнитное излучение) к спиновым или зарядовым степеням свободы (спиновая поляризация, электрический ток). Эта же роль может быть выделена в ещё одном явлении, при котором на систему с расщеплёнными в постоянном магнитном поле уровнями подаётся периодическое электрическое поле на частоте, равной зеемановскому расщеплению, т.е. при $\hbar\omega = \Delta_Z$. При этом наличие СОВ в системе генерирует ненулевой матричный элемент от скалярного потенциала электрического поля для состояний с разной проекцией спина, что приводит к переходам между этими состояниями. Их заселённость вместе с проекцией спина на направление магнитного поля осциллирует по времени с частотой Раби $\hbar \Omega_R = \sqrt{|V_{nk}|^2 + \Delta^2}$ [12], [13], в которой V_{nk} есть матричный элемент перехода, а $\Delta = \hbar(\omega - \omega_{kn})$ есть отстройка по частоте от точного резонанса $\omega = \omega_{kn}$. Это эффект, называемый электрическим дипольным спиновым резонансом (ЭДСР), рассматривается как один из основных механизмов управления спиновой проекцией с помощью электрического поля [35], [55], [112], [212], [213]. Имеются неоднократные экспериментальные наблюдения ЭДСР в полупроводниковых структурах, среди которых особенный, на наш взгляд, интерес представляют структуры с двойной квантовой точкой [60], [199], [201]. Это объясняется тем, что для эффективного воздействия с помощью СОВ на спин, которое приводит к углу поворота ~ , его носитель должен пройти не слишком малое расстояние в пространстве, порядка длины спиновой прецессии $L_{SO} = \pi \hbar^2 / 2m \alpha_R$, где α_R есть

параметр СОВ Рашбы, что было показано в модели спинового полевого транзистора Датты и Даса [15], [77], [277]. Если амплитуда СОВ невелика, то указанное расстояние может превысить длину свободного пробега из-за рассеивания на фононах или дефектах, и упорядочивающее влияние СОВ окажется нивелированным. Кроме того, в ограниченных объектах типа одиночных квантовых точек движение в принципе финитно и влияние СОВ на вращение спина поэтому снижено. Применение структур с двойной квантовой точкой с сильным СОВ увеличивает располагаемую дистанцию движения носителя спина в том числе за счёт туннелирования в соседнюю квантовую точку и обратно, что улучшает перспективы таких систем как структур с управлением спином посредством СОВ и электрического поля. Эта группа задач занимает центральное место и составляет вторую главу диссертационной работы.

Eщë направлением одним ключевым является исследование релаксационных характеристик носителей заряда и спина в полупроводниковых структурах, в том числе поведение времён релаксации импульса, энергии и спина в различных наноструктурах при учёте СОВ. Особенно актуальными эти вопросы становятся при исследовании объектов пониженной размерности, таких как квантовые ямы, одномерные каналы и квантовые точки [111], [184]. Необходимо учитывать целый ряд различных механизмов релаксации, которые могут включать и взаимодействия спинов с фононами, и взаимодействие электронных и дырочных спинов с системой ядерных спинов кристаллической решётки. Всё это существенно усложняет расчёт требуемых характеристик, особенно на этапе экспериментального и технологического изготовления работающих структур спинтроники. Это приводит к естественному желанию предсказать и обнаружить такие эффекты, где главная, наиболее полезная часть эволюции системы проходила бы на достаточно коротких временах, меньших типичных времён энергетической и спиновой релаксации. Поиску и объяснению механизмов таких процессов в значительной степени посвящена глава 2 диссертационной работы.

Четвёртая глава диссертации посвящена сравнительно новому классу материалов в физике конденсированного состояния, называемых

12

топологическими изоляторами (ТИ) [58], [120], [209], [236]. В таких структурах при положении уровня Ферми в запрещённой зоне объёмного материала на его крае (двумерном для трёхмерных ТИ и одномерном для двумерных ТИ) имеются хорошо проводящие электрический ток состояния, защищённые требованиями симметрии от рассеивания на немагнитных примесях. Теория и эксперименты [160], [169], [247] по ТИ в последние два десятилетия развиваются достаточно активно, однако прогресс достигается в основном при исследовании протяжённых краевых состояний. Между тем, для применения ТИ в актуальных приложениях хранению и обработке информации желательно развитие знаний о ПО локализованных состояниях в объектах типа квантовая точка в ТИ. Поскольку состояний в ΤИ локализация чисто электростатическими барьерами затруднительна в силу клейновского туннелирования [133], применяются модели барьерами, разрушающими топологическую с магнитными частично защищённость. Модели таких систем до настоящего времени были развиты преимущественно для идеализированных, высоких или тонких барьеров либо барьеров на крае трёхмерного ТИ [87], [99], [253]. В настоящей диссертации на основе модели взаимодействия краевого состояния с одиночной магнитной примесью [167], [168] развита модель квантовых точек на одномерном крае двумерного ТИ на базе квантовой ямы HgTe/CdTe, где барьеры конечной высоты моделируют макроскопические диэлектрические магниты, расположенные на крае ТИ. Исследуются состояния дискретного и непрерывного спектра, время энергетической релаксации при взаимодействии с фононами, время жизни квазистационарных состояний, регулярная нерегулярная И динамика В периодическом электрическом поле. Кроме того, исследуется возможность наличия фазы ТИ в комбинированном материале с монослоем атомов висмута в (бета-фазе) особенности фазе тримера на подложке ИЗ кремния И магнитопоглощения в трёхмерном ТИ семейства Bi₂Te₃ при учёте «гофрировки» спектра с гексагональным искажением. Полученные результаты позволяют надеяться на перспективы практического изготовления и применения таких структур для приложений.

Цели и задачи диссертационной работы

Целью работы было исследование динамики спина и связанных с ней эффектов в низкоразмерных структурах на основе полупроводников A(3)B(5) (квантовые точки, сверхрешётки, ямы), в которых важную роль играет спинорбитальное взаимодействие (СОВ), а также в квантовых точках, создаваемых в топологических изоляторах. Основной вопрос заключался в выяснении связи СОВ спиновой поляризации с другими динамическими, И туннельными, характеристиками транспортными И оптическими структур, а также С параметрами внешних полей, с целью достижения заданных параметров эволюции как для зарядовой, так и для спиновой степени свободы.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи, которые можно разделить на три группы:

- 1. Исследование эволюции плотности вероятности и спиновой плотности при совместном протекании процессов туннелирования и переворота спина в полупроводниковых структурах с СОВ в переменном электрическом поле, в том числе в двойной квантовой точке и в квантовой точке с большим числом уровней, участвующих в эволюции (прямоугольном квантовом биллиарде). Вычисление частоты переворота спина (частоты Раби) в многоуровневой системе в зависимости от параметров внешнего поля. Определение степени регулярности и нерегулярности динамики в квантовом биллиарде со СОВ через расчёт коррелятора распределений плотности вероятности и спиновой плотности. Расчёт вероятности туннелирования и процессов её ионизации. Изучение режимов совместного управления динамикой туннелирования и переворота спина в двойной квантовой точке с СОВ в режиме электрического дипольного спинового резонанса (ЭДСР), в том числе на субгармониках ЭДСР.
- 2. Исследование квантовых состояний в сверхрешётках со спин-орбитальным взаимодействием. Расчёт спиновых текстур, т.е. пространственных профилей

спиновой плотности, при следующих воздействиях: при рассеивании спинполяризованной волны, падающей на одномерную сверхрешётку, при облучении электромагнитным излучением терагерцового диапазона, а также генерация спиновых текстур на периоде сверхрешётки в постоянном электрическом поле при протекании тока. Решение задачи о кинетике фотолюминесценции в квантовой яме с монослоем марганца, спины которого взаимодействуют со спинами дырок в яме, под действием импульсом лазера с различной поляризацией. Исследование роли обменного взаимодействия спинов в яме и в монослое марганца, а также концентрации резидентных электронов в яме.

3. Построение микроскопической модели квантовых точек на крае двумерного топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe, создаваемых с макроскопических барьеров. Расчёт состояний помощью магнитных дискретного и непрерывного спектра, распределений спиновой поляризации и параметров релаксации энергии при взаимодействии с фононами. Вычисление отклика системы на переменное электрическое поле с учётом ухода в состояния континуума, оценка степени регулярности и нерегулярности режимов эволюции. Расчёт времени жизни квазистационарных состояний при учёте конечной проницаемости барьеров. Вычисление зависимости коэффициента прохождения для взаимодействия волнового пакета из краевых состояний в топологическом изоляторе семейства Bi₂Te₃ с потенциальными барьерами, в том числе с барьерами с намагниченностью. Расчёт особенностей магнитопоглощения в трёхмерном топологическом изоляторе семейства Bi₂Te₃ при учёте гексагонального искажения («гофрировки») спектра. Расчёт состояний объёмного спектра и краевых состояний в материале с монослоем атомов висмута на кремнии в фазе тримера (бета-фазе), характеризующимся большой величиной спин-орбитального взаимодействия, вычисление Z₂ инварианта.

Научная новизна работы

Оригинальность выполненного исследования заключается в предсказании новых динамических свойств спиновой поляризации и различных режимов управления ею при рассмотрении с единых позиций нескольких типов существенно различных структур, которые объединяет сильное спин-орбитальное взаимодействие (полупроводниковые квантовые точки, сверхрешётки, ямы, квантовый биллиард, краевые состояния в топологических изоляторах). При этом впервые:

- Показано, что учёт многоуровневого характера спектра в двойных квантовых точках приводит к существенным отличиям картины осцилляций спиновой проекции от классической для двухуровневой системы. Найдена нелинейная зависимость частоты переворота спина (частоты Раби) от амплитуды электрического поля. Показано, что существуют области параметров как с уменьшением, так и с увеличением частоты переворота спина по сравнению с двухуровневым приближением.
- Для квантовой точки вида прямоугольного квантового биллиарда со многими состояниями, участвующими в эволюции, обнаружено спадание во времени коррелятора плотности вероятности и спиновой плотности с ростом амплитуды спин-орбитального взаимодействия.
- 3. Обнаружены новые режимы туннелирования и спиновой эволюции в двойной квантовой точке в условиях электрического дипольного спинового резонанса, в том числе «гибридный» резонанс, при котором все виды процессов происходят в одной точке пространства параметров системы и который не сводится к двухуровневому приближению, а требует для своего описания минимальной четырёхуровневой модели.
- 4. Показана возможность ускорения переворота спина в рамках механизма ЭДСР в одной квантовой точке при наличии даже слабой туннельной связи с соседней точкой по сравнению с изолированной квантовой точкой. Показано, что управляемые вращения спина возможны не только на основой, но и на

высоких субгармониках ЭДСР, в том числе с поворотом плоскости вращения спина.

- 5. С помощью модели кинетики фотолюминесценции в квантовой яме InGaAs/GaAs с монослоем марганца на расстоянии 2...8 нм от ямы с учётом обменного взаимодействия спинов и различных концентраций резидентных электронов в яме объяснён экспериментально наблюдаемый эффект «спиновой памяти» при взаимодействии спинов дырок со спинами марганца.
- Разработана микроскопическая модель квантовой точки на крае двумерного топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe, сформированной макроскопическими магнитными барьерами с конечной амплитудой.
- 7. В модели квантовой точки на краю топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe найдены параметры энергетической релаксации при учёте электрон-фононного взаимодействия для различных температур и различных ветвей спектра электронов и фононов.
- 8. В модели широкой квантовой точки со многими уровнями на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe в периодическом электрическом поле обнаружена иррегулярная динамика с признаками квантового хаоса.
- Получены времена жизни квазистационарных состояний в квантовой точке с магнитными барьерами конечной проницаемости на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe.
- 10. Определены оптимальные параметры электрического поля для управления заселённостями уровней в квантовой точке на базе топологического изолятора, при которых быстрая смена заселённостей на временах, меньших времени релаксации, не сопровождается заметной «утечкой» в континуум.
- 11. Построена модель объёмных и краевых состояний для электронов в монослое висмута на кремнии в фазе тримера (бета-фазе). Рассчитан Z₂ инвариант, ненулевое значение которого классифицирует данный материал как двумерный топологический изолятор.

Практическая значимость работы

Олной полупроводниковой спинтроники ИЗ основных задач И развивающейся физики топологических изоляторов является повышение эффективности уже известных и применение новых механизмов управления спином пониженной В структурах с размерностю, сниженным энергопотреблением, в постоянном либо вовсе отсутствующем магнитном поле. В данной диссертационной работе основное внимание уделено фундаментальным механизмам генерации и управления спиновой поляризации в различных классах структур на основе единого подхода с использованием спин-орбитального взаимодействия. Реализованная возможность достаточно полного анализа возникающих режимов позволяет выявить наиболее благоприятные области для последующей экспериментальной и, возможно, параметров системы технологической и приборной реализации исследуемых в диссертационной работе явлений.

Предсказываемые работе свойства спиновой поляризации В полупроводниковых сверхрешёток могут быть реализованы при современном уровне технологии. Рассчитанный эффект «спиновой памяти» в квантовой яме с дырками, спины которых взаимодействуют со спинами близко расположенного монослоя атомов марганца, уже наблюдался в экспериментах, которые и служили мотивацией для решения этой задачи. Динамические явления в двойных квантовых точках с сильным спин-орбитальным взаимодействием рассчитаны в работе для условий, обеспечивающих реализацию полезных операций со спином на максимально коротких временах, когда эффекты декогерентности и релаксации ещё не сказываются сильно, что важно для практических применений. Предсказываемая в работе возможность управления спином в двойной квантовой субгармониках ЭДСР обеспечить точке на высоких может важное технологическое преимущество, когда по аппаратным ограничениям базовая гармоника плохо достижима по частоте. Наконец, рассчитанные в работе параметры формируемых магнитными барьерами квантовых точек на крае топологического изолятора позволяют говорить о реалистичности создания таких

18

локализующих состояния структур в новом классе материалов с топологической защищённостью. Это позволяет рассчитывать на их практическое изготовление, исследование и внедрение в новых поколениях элементов для хранения и обработки информации.

Основные научные положения, выносимые на защиту

- 1. В двойных полупроводниковых квантовых точках со спин-орбитальным взаимодействием и числом уровней, вовлекаемых в эволюцию, больше двух, в условиях электрического дипольного спинового резонанса может иметь место сильное отклонение от линейной зависимости для частоты переворота спина как функции амплитуды периодического поля. При изменении соотношения между туннельным и зеемановским расщеплениями возможно как уменьшение, так и увеличение частоты переворота спина по сравнению с двухуровневым приближением.
- 2. В двойной полупроводниковой квантовой точке в условиях электрического дипольного спинового резонанса в некоторых точках пространства параметров имеет место гибридизация туннельного и спинового резонансов, при этом динамика описывается четырёхуровневым приближением.
- 3. В двойной полупроводниковой квантовой точке в режиме электрического дипольного спинового резонанса с ростом слабого (меньше зеемановского) туннельного расщепления увеличивается скорость переворота спина по сравнению с изолированной квантовой точкой, как на основной гармонике, так и на субгармониках резонанса.
- 4. Эффект «спиновой памяти», возникающий при воздействии коротких лазерных импульсов различной круговой поляризации на структуру с квантовой ямой InGaAs/GaAs с монослоем марганца на расстояниях в несколько нанометров от ямы, объясняется в рамках кинетической модели, включающей обменное взаимодействие спинов фотоиндуцированных дырок и магнитных моментов монослоя, а также различной концентрацией

резидентных электронов в яме, в зависимости от дистанции от монослоя до ямы.

- 5. Модель локализованных состояний в квантовой точке, формируемой на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe с помощью макроскопических магнитных барьеров с конечной амплитудой, может быть построена в рамках обобщения модели взаимодействия краевых состояний с одиночной магнитной примесью. В рассматриваемой системе для любой амплитуды барьеров со взаимно параллельной намагниченностью, ортогональной направлению края, возможно существование только одной пары уровней дискретного спектра.
- 6. Для квантовой точки, образованной магнитными барьерами на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe и помещённой в периодическое электрическое поле, существуют интервалы параметров системы (амплитуда и ширина барьеров, ширина квантовой точки, амплитуда электрического поля), в которых заселённость пары дискретных уровней осциллирует на временах, существенно меньших времени ухода в состояния континуума, времени релаксации энергии для переходов с верхнего на нижний уровень с участием фононов, а также времени жизни квазистационарных состояний при учёте проницаемости барьеров.

Личный вклад автора

Диссертационная работа основана на статьях и главе в монографии, написанных автором во время его работы на кафедре теоретической физики ННГУ и в НИЛ теоретической физики ННГУ в рамках выполнения проектов, поддержанных грантами Министерства науки и высшего образования РФ и РФФИ. Большинство статей написано с соавторами-сотрудниками ННГУ или иных организаций. При выполнении работ в соавторстве автором выполнялась значительная часть работы по постановке задачи, основная часть работы по аналитическим и численным расчётам, построению графиков и написанию текста статей, значительная часть работы по анализу результатов. Основная часть работы по апробации результатов работы на конференциях и семинарах также выполнялась лично автором.

Апробация работы

С 2006 года результаты диссертационной работы представлялись автором на различных семинарах, конференциях и симпозиумах, среди которых:

– Международный симпозиум «Нанофизика и наноэлектроника», Нижний Новгород, 2006–2023;

- XV Российская конференция по физике полупроводников, Нижний Новгород, 2022;

– Международная конференция PhysicA.SPb, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 2020-2022;

 Совещание по теории твёрдого тела, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 2023;

– Низкоразмерный семинар, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, 2020,
2022;

Семинар «Оптическая спектроскопия» лаборатории неравновесных электронных процессов Института физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Московская область, 2023;

Семинар кафедры теоретической физики МФТИ, Долгопрудный, Московская область, 2023;

Семинар сектора квантовой мезоскопики Института теоретической физики им.
Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Московская область, 2023;

 Семинар «Физика наноструктур» кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники физического факультета МГУ, Москва, 2023;

 Семинар лаборатории теоретической физики Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, 2023;

 Семинар группы магнитных и спиновых логических процессов и устройств
Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Московская область, 2024; Семинар Всероссийского научно-исследовательского института автоматизации им. Н.Л. Духова, Москва, 2024;

– Семинар лаборатории спиновой оптики Санкт-Петербургского государственного университета, Санкт-Петербург, 2024;

 Семинары по физике полупроводников и по физике твёрдого тела, ИФМ РАН, Нижний Новгород, 2020, 2023;

Семинары кафедры теоретической физики ННГУ, Нижний Новгород, 2020, 2024.

Публикации

Всего по теме диссертации опубликовано 30 статей и одна глава в монографии (см. список работ автора в конце диссертации), из них 11 статей в отечественных журналах, рекомендованных ВАК, и 19 статей в зарубежных реферируемых высокорейтинговых журналах, а также 2 учебно-методических пособия, изданных в ННГУ им. Н.И. Лобачевского.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы, включающего 277 наименований, и списка основных работ автора по теме диссертации, включающего 33 наименования. Общий объём диссертации составляет 429 страниц, включая 167 рисунков и 2 таблицы.

Благодарности

Автор выражает глубокую благодарность своим коллегам по кафедре теоретической физики физического факультета ННГУ им. Н.И. Лобачевского, со многими из которых в соавторстве был написан ряд статей в рамках работы. Особенно значимым является вклад учителя автора, в течение многих лет заведовавшего кафедрой теоретической физики, Заслуженного деятеля науки РФ профессора В.Я. Демиховского, светлой памяти которого посвящается эта диссертация. Также автор благодарит коллег-преподавателей физического

факультета ННГУ, в особенности заведующего кафедрой теоретической физики В.А. Бурдова, а также Е.В. Чупрунова, Г.М. Максимову, А.А. Перова, А.И. A.B. Тележникова, А.А. Конакова, M.B. Малышева, Бастракову, М.О. Марычева за плодотворные обсуждения и поддержку при написании данной работы, аспирантов кафедры Е.А. Лаврухину, Д.А. Кулакова, А.А. Чубанова, выпускников кафедры К.С. Кабаева, Л.В. Гуляева. Автор признателен коллективу сотрудников лаборатории спиновой электроники НИФТИ ННГУ за многочисленные обсуждения и поддержку при написании работы, в их числе М.В. Дорохину, Ю.А. Данилову, О.В. Вихровой. Автор выражает благодарность сотрудникам Института физики микроструктур РАН (Нижний Новгород), приглашавшим его на семинары, где были представлены основные разделы диссертации, в их числе А.С. Мельникову, З.Ф. Красильнику, В.И. Гавриленко, В.Я. Алёшкину, С.В. Морозову, Д.А. Татарскому. Также автор признателен сотрудникам различных институтов РАН и университетов, приглашавшим его для выступлений на семинары и совещания, на которых были представлены различные задачи из диссертации. Особенную признательность автор выражает Института физики твёрого тела им. Ю.А. сотрудникам Осипьяна РАН обл.), (Черноголовка, Московская В И.В. Кукушкину ИХ числе И В.Д. Кулаковскому, сотрудникам группы магнитных и спиновых логических процессов и устройств Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии РАН (Черноголовка, Московская область), в их числе Р.Б. Моргунову, сотруднику лаборатории поверхностных явлений Института физики прочности и материаловедения СО РАН (Томск) С.В. Еремееву, сотруднику Российского федерального ядерного центра – Всероссийского научно-исследовательского института экспериментальной физики (Саров) Ю.Б. Кудасову, сотрудникам Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург), в их числе М.М. Глазову, С.А. Тарасенко, Н.С. Аверкиеву, сотрудникам кафедры атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники МГУ (Москва), в их числе Н.В. Клёнову и М.Ю. Куприянову, сотрудникам Института теоретической физики Л.Д. Ландау PAH ИМ.

Московская область), в их числе И.С. Бурмистрову (Черноголовка, И М.А. Скворцову, сотрудникам кафедры теоретической физики МФТИ (Долгопрудный, Московская область), В ИХ числе Л.Е. Федичкину И Ю.М. Белоусову, сотрудникам лаборатории теоретической физики Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (Новосибирск), в их числе В.М. Ковалёву и М.В. Энтину, сотрудникам Всероссийского научноисследовательского института автоматизации им. Н.Л. Духова (Москва), в их числе В.В. Погосову и А.А. Елистратову, сотрудникам лаборатории спиновой оптики Санкт-Петербургского государственного университета, в их числе К.В. Кавокину и И.В. Игнатьеву. Автор выражает признательность своим зарубежным соавторам, в их числе Е.Я. Шерману из Университета Страны Басков (Бильбао, Испания) и С.А. Студеникину из Национального совета по исследованиям (Оттава, Канада).

ГЛАВА 1

НЕКОТОРЫЕ ЗАДАЧИ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СПИНТРОНИКИ И ФИЗИКИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)

1.1. Спин-орбитальное взаимодействие в полупроводниковых структурах

1.1.1. Введение

Раскладывая уравнение Дирака для электрона во внешнем поле по степеням v/c, где v есть скорость электрона и c есть скорость света, во втором порядке можно получить слагаемое, описывающее энергию взаимодействия движущегося магнитного момента с электрическим полем [4], [15], [261]:

$$H_{SO} = \frac{\lambda_0}{\hbar} \vec{\sigma} [\vec{p}, \nabla U]$$
(1.1)

Оператор (1.1) называется гамильтонианом спин-орбитального взаимодействия (СОВ). В (1.1) ∇U есть градиент потенциальной энергии, пропорциональный электрическому полю, постоянная $\lambda_0 = -\hbar^2/4m_0^2c^2 = -3.7\cdot10^{-8}$ нм², \vec{p} – оператор импульса электрона, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – векторный оператор из матриц Паули второго порядка. Из вида оператора (1.1) можно сделать вывод, что действие СОВ можно трактовать как проявление эффективного магнитного поля, зависящего от градиента потенциала и волнового вектора. Конкретная форма гамильтониана СОВ в кристаллической решётке или в гетероструктуре зависит от симметрии структуры. В нашей работе мы ограничимся наиболее простыми вкладами, которые связывают с именами Г. Дрессельхауза и Э.И. Рашбы.

1.1.2. Вклад Дрессельхауза

Спин-орбитальное взаимодействие в его исходной форме (1.1) относится к электрону в поле окружающей его сложной кристаллической структуры, в том числе потенциала кристаллической решётки, а \vec{p} есть оператор импульса электрона. Волновая функция в рамках зонной теории строится обычно в рамках метода огибающей, в которой истинный импульс заменяется квазиимпульсом, а

глубоких сложные комбинации потенциала кристаллической решётки И электронных оболочек заменяются на различные формы эффективного потенциала. Периодическая часть $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ блоховской волновой функции, у которой вводится новое квантовое число - квазиимпульс, строится в виде разложения по набору базисных функций, имеющих определённую симметрию. Это приводит к секулярному уравнению на энергию, содержащему компоненты квазиимпульса в различной степени. В зависимости от типа симметрии кристаллической решётки зонная структура может быть построена в рамках метода инвариантов [2], [5], [261], в котором для каждой энергетической зоны составляется свой набор комбинаций компонент квазиимпульса и спиновых матриц, В котором выделяются вклады, ответственные за СОВ. Так, для полупроводников *n*-типа со структурой цинковой обманки, где отсутствует центр инверсии, вклад Дрессельхауза в СОВ имеет вид [15], [91], [261]

$$H_{D,3D} = \gamma k_x (k_y^2 - k_z^2) \sigma_x + \gamma k_y (k_z^2 - k_x^2) \sigma_y + \gamma k_z (k_x^2 - k_y^2) \sigma_z, \qquad (1.2)$$

Для полупроводников GaAs и InAs константа γ равна 27 эВ·Å³ [15]. Нас интересует вклад Дрессельхауза в низкоразмерных структурах, прежде всего в двумерном электронном газе, где движение вдоль оси Оz, совпадающей с направлением роста квантовой ямы ширины *d*, финитно. В этом случае гамильтониан (1.2) после усреднения $\langle k_z^2 \rangle = (\pi/d)^2$ приводится к виду, в котором главный член линеен по квазиимпульсу:

$$H_D = \beta_D(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y), \qquad (1.3)$$

где параметр Дрессельхауза $\beta_D \approx -\gamma (\pi/d)^2$. Вклад Дрессельхауза вида (1.3) в линейном приближении по квазиимпульсу может существовать и для дырочных состояний в низкоразмерных структурах вида квантовой ямы или квантовой проволоки (канала), если состояния в выделенной зоне размерного квантования описываются в рамках скалярной эффективной массы [152], [261].

1.1.3. Вклад Рашбы

Другая форма вклада в СОВ, которая может существовать в гетероструктуре, обусловлена отсутствием симметрии её макроскопического потенциала. В этом случае вклад Рашбы в СОВ имеет вид [8], [15], [35], [261]

$$H_1 = -\frac{1}{2}\vec{b}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma}, \qquad (1.4)$$

где $\vec{b}(\vec{k})$ есть эффективное магнитное поле, зависящее от квазиимпульса. Пусть в квантовой яме, выращенной вдоль направления, которое мы обозначим как *z*, потенциал конфайнмента обладает свойством $V(z) \neq V(-z)$. Тогда эффективное магнитное поле $\vec{b}(\vec{k})$ примет вид

$$\vec{b}(\vec{k}) = 2\alpha_R[\vec{e}_z, \vec{k}], \qquad (1.5)$$

где параметр Рашбы α_R зависит от конкретного потенциала гетероструктуры V(z). Подставив (1.5) в (1.4), мы получим стандартную форму гамильтониана Рашбы

$$H_R = \alpha_R (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y). \tag{1.6}$$

Значения параметров Дрессельхауза β_D и Рашбы α_R зависят от типа материала и параметров гетероструктуры. В типичных полупроводниковых гетероструктурах на базе GaAs эти параметры составляют 1...5 мэВ·нм, а в более узкозонных полупроводниках на базе, например, InSb, могут составлять 20...30 мэВ·нм [92], [261].

1.1.4. Спектр и спиновая поляризация при наличии СОВ

Простейший спектр в двумерном электронном газе со СОВ Рашбы (1.6) может быть получен в рамках приближения эффективной массы с гамильтонианом

$$H = k^2 / 2m + H_R,$$
 (1.7)

где $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Волновая функция для спина $\frac{1}{2}$ имеет вид двухкомпонентного спинора

$$\psi_{\lambda\bar{k}} = \frac{e^{i\bar{k}\bar{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ \lambda e^{i\theta(\bar{k})} \end{pmatrix}, \quad \lambda = -1, 1, \quad \theta = \operatorname{Arg}(k_y - ik_x), \quad (1.8)$$

где $\vec{r} = (x, y)$. Спектр имеет две ветви дисперсии

$$E_{\lambda}(k_x, k_y) = k^2/2m + \lambda \alpha_R k, \quad \lambda = -1, 1,$$
 (1.9)

показанные в разрезе на рис.1.1 [42], расщепление между которыми при данном k равно

$$\Delta_{\rm SO} = 2\alpha_R k. \tag{1.10}$$

Для типичных гетероструктур с $\alpha_{\rm R}$ = 1...10 мэВ·нм и $k \sim 0.01...0.1$ нм⁻¹ это составляет величину от 0.01 до 1 мэВ, что требует для экспериментального наблюдения достаточно совершенных структур и низких температур порядка 1К и ниже. Спиновая поляризация состояний (1.8), определяемая как среднее значение $\sigma_i(\lambda, \vec{k}) = \langle \psi_{\lambda \vec{k}} | \sigma_i | \psi_{\lambda \vec{k}} \rangle$ от соответствующей матрицы Паули σ_i , определяет плоское векторное поле в плоскости (k_x, k_y), поскольку $\sigma_z \equiv 0$:

$$\vec{\sigma}(\lambda,k) = \lambda(\cos\theta, \sin\theta), \quad \lambda = -1, 1. \tag{1.11}$$
$$E_{\lambda}(k_x, k_y)$$



Рисунок 1.1. Спектр для закона дисперсии (1.9) в приближении эффективной массы и при наличии СОВ Рашбы. Половина поверхности $E_{\lambda}(k_x, k_y)$ удалена для наглядности восприятия [42].

Распределение (1.11) показано на рис.1.2, где панели (а) и (б) отвечают нижней и верхней зоне закона дисперсии (1.9).



Рисунок 1.2. Спиновая поляризация (1.10) в (а) нижней и (б) верхней зоне закона дисперсии (1.9) [42].

Из рис.1.1 и рис.1.2 можно видеть, что закон дисперсии и спиновая поляризация для гамильтониана (1.7) обладают осевой симметрией. При совместном присутствии вкладов Рашбы (1.6) и Дрессельхауза (1.3) осевая симметрия на рис.1.1 и рис.1.2 пропадает, остаётся только симметрия $E_{\lambda}(k_x, k_y) = E_{\lambda}(-k_x, -k_y)$ в силу теоремы Крамерса и симметрия $\vec{\sigma}(\lambda, \vec{k}) = -\vec{\sigma}(\lambda, -\vec{k})$, отражающая отсутствие спиновой поляризации во всём электронном газе в целом, если проинтегрировать распределение $\vec{\sigma}(\lambda, \vec{k})$ по двумерному квазиимпульсу.

1.1.5. Спиновая прецессия вдоль траектории при наличии СОВ

При наличии СОВ Рашбы (1.6) спиновые состояния при движении в плоскости гетероструктуры будут испытывать прецессию спина вокруг направления эффективного магнитного поля (1.5). Это явление легло в основу концепции спинового полевого транзистора Датты и Даса [15], [77], [277], схема которого показана на рис.1.3. Источник (слева) и сток (справа) являются ферромагнитными электродами. Поляризованные по спину электроны движутся слева направо и испытывают прецессию вокруг вектора эффективного магнитного поля (1.5), обусловленного СОВ в канале, который перпендикулярен вектору нормали $\vec{n} = \vec{e}_z$. Величина поля пропорциональна параметру Рашбы α_R , которым можно управлять через поле затвора V_G . Ток стока максимален, если при очень малом СОВ электроны приходят на сток с параллельным спином (верхний ряд) и минимален, если спин электронов на стоке противоположен спину на истоке (нижний ряд) [277].



Рисунок 1.3. Схема спинового полевого транзистора Датты и Даса. Источник (слева) и сток (справа) являются ферромагнитными электродами. Поляризованные по спину электроны движутся слева направо и испытывают прецессию вокруг вектора эффективного магнитного поля (1.5), обусловленного СОВ в канале, который перпендикулярен вектору нормали $\vec{n} = \vec{e}_z$. Величина поля пропорциональна параметру Рашбы α_R , которым можно управлять через поле затвора V_G . Ток стока максимален, если при очень малом СОВ электроны приходят на сток с параллельным спином (верхний ряд) и минимален, если спин электронов на стоке противоположен спину на истоке (нижний ряд) [277].

Частота прецессии электронов в эффективном магнитном поле (1.5) есть $\omega = 2\alpha_R k$ и при пролёте канала длины *L* в приближении эффективной массы при параллельном падении вдоль оси канала спин повернётся на угол $\varphi = 2\alpha_R mL/\hbar$ [15], [77], [277]. Чтобы поворот был на существенный угол $\varphi \approx \pi$, спин должен пройти в канале расстояние

$$L_{SO} = \frac{\pi}{2} \frac{\hbar^2}{m\alpha_R},\tag{1.12}$$

называемое длиной спиновой прецессии. Похожее определение L_{SO} как «спинорбитальной длины» можно найти и в других источниках [112]. В большинстве полупроводников её значение лежит в интервале 0.3 – 1 мкм, что сравнимо с длиной свободного пробега в самых высококачественных структурах. Всё это, а также некоторые другие факторы, в том числе трудности с сопряжением ферромагнитных электродов и полупроводникового канала, затрудняют использование идеи Датты и Даса в «чистом» виде. Тем не менее, физический механизм прецессии спина благодаря СОВ при его пространственном движении на масштабе порядка длины спиновой прецессии (1.12) может реализовываться в различных наноструктурах, в том числе в двойной квантовой точке при наличии эффективного туннелирования между точками, что будет использовано в задачах главы 2 настоящей диссертации.

1.2. Квантовые точки со СОВ и электрический дипольный спиновый резонанс

1.2.1. СОВ и электрический дипольный спиновый резонанс

Для приложений в наноэлектронике, спинтронике и задачах обработки информации удобны компактные объекты, такие как квантовые точки (КТ), где волновая функция электронов или дырок локализована по всем трём пространственным степеням свободы. При наличии внешнего постоянного магнитного поля вырождение по спину для таких локализованных состояний снимается, и уровни энергии приобретают квантовое число σ_z , характеризующее *z*-проекцию спина на направление магнитного поля $Oz \parallel \vec{B}$. При этом в присутствии СОВ эта проекция, вообще говоря, не описывает спин состояния полностью, т.к. могут иметь ненулевое значение и остальные две проекции спина σ_x , σ_v в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Относительную величину проекций $\sigma_{x,y}/\sigma_z$ можно оценить из энергетического отношения Δ_{SO}/Δ_Z , где $\Delta_{SO}\sim \alpha k_{12}$ есть матричный элемент от СОВ Рашбы или Дрессельхауза между локализованными состояниями |1> и |2>. Для типичных параметров КТ на базе GaAs с $\alpha_R \sim 3$ мэВ·нм, линейным размером $d\sim50$ нм, эффективной массой $m\sim0.1m_0$ и g-фактором 1.35, использовавшихся в недавних экспериментах с магнитными полями $B_z \sim 1$ T [60], [250], в численных расчётах [152], [154] мы получали $\Delta_{SO}\sim1$ мкэВ и $\Delta_Z \sim 80$ мкэВ, что даёт отношение $\sigma_{x,y}/\sigma_z \sim 0.01$. Таким образом, состояния в КТ с СОВ в магнитном поле поляризованы по спину почти параллельно или антипараллельно внешнему магнитному полю $B_z \sim 1$ T, с небольшой отстройкой от направления B_z , обусловленной СОВ.

Следует отметить, что гамильтониан системы Н в постоянном магнитном поле ||Оz с зеемановским слагаемым $H_Z = g\mu_B B_z \sigma_z/2$ и в присутствии СОВ (1.3) или (1.6) содержит комбинации по крайней мере двух различных матриц Паули (одна или две от СОВ и одна от зеемановского слагаемого) даже для одномерной структуры вида квантовой проволоки, в которой потенциалом затвора создаётся профиль одиночной или двойной квантовой точки, рассматриваемой в том числе в экспериментах, описанных ниже в п.1.2.3. Это означает, что *H* не коммутирует ни с одним из операторов спиновой проекции, также пропорциональному матрице Паули, т.е. спин (и в целом момент импульса) в задаче со СОВ в магнитном поле хорошим квантовым числом. Отмеченная не является выше структура двухкомпонентных волновых функций в присутствии COB имеет вид (ψ_1, ψ_2), где обе компоненты отличны от нуля, хотя и различны по амплитуде – для состояния с преимущественной проекцией спина < s_>>>1 первая компонента доминирует, а для состояния с <_σ>≈−1 доминирует вторая компонента. Вклад от меньшей по амплитуде компоненты пропорционален величине СОВ. Тем не менее, такое состояние не является собственной функцией вида (1, 0) или (0, 1) оператора σ_z , т.е. говорить о состоянии с проекцией спина «по полю» или «против поля» можно лишь с приблизительной точностью. Между состояниями с ненулевыми компонентами (ψ_1 , ψ_2) отличен от нуля матричный элемент скалярного потенциала электрического поля, что делает возможным переходы между такими

уровнями в рамках явления электрического дипольного спинового резонанса, о котором пойдёт речь ниже.

Если на систему с расщеплёнными по спину в постоянном магнитном поле уровнями $|k\rangle$ и $|n\rangle$ подаётся периодическое электрическое поле $F \cdot \sin(\omega t)$ на частоте, равной зеемановскому расщеплению, т.е. при

$$\hbar\omega = \Delta_Z, \qquad (1.13)$$

то при наличии СОВ может возникать ненулевой матричный элемент от скалярного потенциала электрического поля $V(x,t)=-e \cdot x \cdot F \cdot \sin(\omega t)$, т.е. матричный элемент оператора координаты

$$x_{kn} = \left\langle k \mid x \mid n \right\rangle \tag{1.14}$$

для состояний с разной проекцией спина, что приводит к переходам между этими состояниями. При этом заселённость соответствующей пары уровней вместе с проекцией спина на направление магнитного поля осциллирует по времени с частотой Ω_R , называемой частотой Раби [12], [13], [37], [66], [112], [213]:

$$\hbar\Omega_R = \sqrt{|V_{nk}|^2 + \Delta^2}, \qquad (1.15)$$

где V_{nk} есть матричный элемент перехода, а $\Delta = \hbar(\omega - \omega_{kn})$ есть отстройка по частоте от точного резонанса $\omega_{kn} = \Delta_Z / \hbar$. Этот эффект, называемый электрическим дипольным спиновым резонансом (ЭДСР), рассматривается как один из основных механизмов управления спиновой проекцией с помощью электрического поля. Частота (1.15) называется частотой Раби прежде всего для двухуровневой системы, однако часто её называют так и в многоуровневой системе, если переворот спина связан с переходами преимущественно между одной парой уровней. Манипулирование спином в системах со СОВ при помощи электрического поля является одним из физических принципов в схемах спиновых, зарядовых или гибридных кубитов [53], [63], [70], в том числе в многоуровневых системах [173].

1.2.2. Эффекты интерференции Ландау-Зенера-Штюкельберга-Майораны при туннелировании в квантовых точках

При изучении нестационарных транспортных и спиновых явлений в полупроводниковых структурах, в том числе в квантовых точках, достаточно часто встречаются ситуации, при которых положение одних уровней относительно других изменяется во времени, образуя конфигурацию с близким прохождением уровней энергии. При этом вопрос о вероятности перехода между такими сближающимися и расходящимися состояниями решается в рамках задачи Ландау-Зенера, которую в последнее время связывают также с именами Штюкельберга и Майораны, называя соответствующую группу задач интерференционными явлениями Ландау-Зенера-Штюкельберга-Майораны, или LZSM-явлениями [17], [126], [240]. В простейшем случае рассматриваемая система является двухуровневой и описывается гамильтонианом вида

$$H(t) = -\frac{\Delta}{2}\sigma_x - \frac{\varepsilon(t)}{2}\sigma_z = -\frac{1}{2} \begin{vmatrix} \varepsilon(t) & \Delta \\ \Delta & -\varepsilon(t) \end{vmatrix},$$
(1.16)

в базисе из двух состояний |0>, |1>, для которых до взаимодействия состояние |0> было верхним, а состояние |1> нижним, как это показано на рис.1.4 из обзора [126]. Зависимость $\varepsilon(t)$ в первом приближении при сближении уровней можно считать линейной, $\varepsilon(t)=vt$. Спектр гамильтониана (1.16) является нестационарным и описывается в терминах энергий так называемого адиабатического базиса,

$$E_{\pm}(t) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon^2(t)} \,. \tag{1.17}$$

При этом для вероятности перехода *Р* между двумя уровнями справедливо выражение

$$P = \exp(-2\pi\delta), \tag{1.18}$$

где параметр б, называемый параметром адиабатичности, определяется как

$$\delta = \frac{\Delta^2}{4\hbar v}.\tag{1.19}$$

Для медленной (адиабатической) эволюции параметр $\delta >>1$, и вероятности перехода Р~0, т.е. система остаётся на нижнем по энергии уровне, как это показано на рис.1.4, где случаю Р~0 отвечает положение системы на нижней синей кривой до (слева) и после (справа) взаимодействия в адиабатическом базисе (1.17). В противоположном (диабатическом) пределе быстрой эволюции параметр $\delta \ll 1$ и вероятность перехода $P \sim 1$, что отвечает переходу с нижней (синей) на верхнюю (красную) кривую на рис.1.4 при движении по времени слева направо. Отметим, что случай адиабатической эволюции в действительности означает переход из базисного состояния |1> в базисное состояние |0>, как это видно на рис.1.4. Действительно, при нестационарном изменении энергии уровней согласно (1.17) нижнее до взаимодействия (слева на рис.1.4) состояние |1> после взаимодействия становится верхним состоянием (справа на рис 1.4), а состояние |0>, наоборот, из верхнего становится нижним.



Рисунок 1.4. Переходы при эволюции двухуровневой системы (1.16) в рамках модели Ландау-Зенера-Штюкельберга-Майораны (LZSM) при (а) однократном, (b) двукратном и (c) многократном прохождении уровней [126].

Адиабатическая эволюция с $\delta > 1$ означает сохранение системы в нижнем энергетическом состоянии E_{-} из (1.17), в так называемом адиабатическом базисе, что показано на панели (а) на рис.1.5 из того же обзора [126], где

вероятность перехода после расчёта нестационарной эволюции с $\delta=2$ и $\delta=0.05$ показана как функция безразмерного времени $\tau = t \sqrt{v/2\hbar}$. При рассмотрении эволюции в исходном базисе состояний |0>, |1>, о чём мы писали выше, в так называемом диабатическом базисе, происходит переход между состояниями |1> и |0>, как это показано на панели (b) рис.1.5.



Рисунок 1.5. Вероятность перехода между уровнями на рис.1.4 в (a), (c) адиабатическом базисе состояний с энергиями (1.17) и (b), (d) в диабатическом базисе исходных состояний |1>, |0>. Панели (a), (b) отвечают медленной (адиабатической) эволюции с δ=2, панели (c), (d) отвечают быстрой (адиабатической) эволюции с δ=0.05 [126].

В противоположном пределе быстрой (диабатической) эволюции параметр $\delta <<1$ и вероятность перехода $P \sim 1$. На рис.1.5 (с), (d) показан пример для значения $\delta = 0.05$. При этом вероятность перехода достаточно велика как в
адиабатическом базисе (вероятность P_+ на панели (с) на рис.1.5), так и в диабатическом базисе состояний |1> и |0> (вероятность P_0 на панели (d) на рис.1.5). В первом случае $P\sim0.7$, во втором случае среднее значение $P\sim0.55$. Это означает, что и для быстрых переходов существует заметная вероятность перейти в другое базисное состояние.

Для многократного прохождения уровней друг мимо друга при периодическом изменении параметра системы

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + A \sin \omega t, \qquad (1.20)$$

в периодическом поле (параметр ε_0 при этом обычно называют смещением (detuning)), существует точное решение для усреднённой по многим периодам поля $T=2\pi/\omega$ вероятности перехода P_{12} в двухуровневой системе:

$$\overline{P}_0 = \frac{1}{2} \sum_{k} \frac{\Delta_k^2}{\left(k\omega - \varepsilon_0 / \hbar\right)^2 + \Delta_k^2}, \qquad (1.21)$$

где $\Delta_k = \Delta \cdot J_k (A/\hbar\omega)$ и J_k есть функция Бесселя *k*-го порядка. Учёт релаксации энергии с обратным временем Γ_1 и релаксации фазы с обратным временем Γ_2 приводит к некоторой модификации $\Delta_k \to \widetilde{\Delta}_k$ в (1.21) и к дополнительному слагаемому лоренцевского типа в знаменателе [126],

$$\overline{P}_{up} = \frac{1}{2} \sum_{k} \frac{\widetilde{\Delta}_{k}^{2}}{\frac{\Gamma_{1}}{\Gamma_{2}} (k\omega - \varepsilon_{0} / \hbar)^{2} + \widetilde{\Delta}_{k}^{2} + \Gamma_{1} \Gamma_{2}}, \qquad (1.22)$$

но не меняет принципиальную картину. Типичные интерференционные картины для вероятности (1.22) в плоскости параметров ($\varepsilon_0/\hbar\omega, A/\hbar\omega$) показаны на рис.1.6 из обзора [126] для высокочастотного случая $\hbar\omega > \Delta$ (слева), для случая промежуточной частоты $\hbar\omega \approx \Delta$ (в центре) и для низкочастотного случая $\hbar\omega < \Delta$ (справа).



Рисунок 1.6. Интерференционные картины для усреднённой вероятности (1.22) в плоскости параметров ($\varepsilon_0/\hbar\omega, A/\hbar\omega$) для высокочастотного случая $\hbar\omega > \Delta$ (слева), для случая промежуточной частоты $\hbar\omega \approx \Delta$ (в центре) и для низкочастотного случая $\hbar\omega < \Delta$ (справа) [126].

В наших задачах по изучению спиновой динамики и туннелирования в двойной квантовой точке в главе 2 режим LZSM интерференции будет соответствовать в основном случаю высоких частот. Интерференционная картина на рис.1.6 вдоль горизонтальной оси $\varepsilon_0/\hbar\omega$ обусловлена многофотонными резонансами вида

$$k \cdot \hbar \omega = \varepsilon_0, \tag{1.23}$$

при которых detuning ε_0 , отвечающее расстоянию между уровнями с выключенным периодическим полем (A=0 в (1.20)), соответствует целому числу квантов электромагнитного поля k=0, 1, -1, 2, -2,.... Ступени (1.23) наблюдаются, когда амплитуда поля A близка или превосходит смещение ε_0 , поэтому набор максимумов расширяется в сторону роста A, что даёт название «воронка» (funnel) структурам на рис.1.6. Соответствующее усиление туннелирования в периодическом поле (1.20), например, между двумя квантовыми точками, уровни энергии которых связаны матричным элементом Δ и отстоят на величину ε_0 , удовлетворяющую (1.23), будет также описываться в плоскости ($\varepsilon_0/\hbar\omega, A/\hbar\omega$) выражением вида (1.21) и носит название photon assisted tunneling (PAT). Что касается почти периодической структуры вдоль вертикальной оси $A/\hbar\omega$ на рис.1.6, то она обусловлена зависимостью функции Бесселя в Δ_k от своего аргумента в (1.21), (1.22). Интерференционные LZSM-явления проявляются и в других физических системах, в том числе в связанных джозефсоновских кубитах [195], [227], [228], в системах с несколькими уровнями и несколькими электронами [275], [276], а также в системах, где важны эффекты диссипации [61], [126], [272].

1.2.3. Эксперименты по ЭДСР и туннелированию в квантовых точках

Динамические задачи в двойных квантовых точках привлекают внимание на протяжении многих лет, во многом благодаря возможностям реализации различных режимов пространственной и спиновой динамики в одной системе. Имеются многочисленные теоретические публикации с моделями, в которых фигурируют потенциалы вида двойной ямы или иные аппроксимации двойной КТ, среди которых можно упомянуть работы [69], [70], [98], [114], [117], [172], [173], [174], [275], [276]. Кроме того, описаны экспериментальные наблюдения ЭДСР в полупроводниковых структурах, среди которых особенный, на наш взгляд, интерес представляют структуры с двойной квантовой точкой (КТ) как в одноэлектронном режиме в структурах с электронами [161], [198], [199], [201] и с дырками [60], [187], [204], [208], [250], так и в двухэлектронном режимах [98], [207]. В работе [201], результаты из которой показаны на рис.1.7, ЭДСР наблюдался в одной (правой на рис.1.7) из двух туннельно связанных КТ, созданных полем затвора в двумерном электронном газе на основе GaAs. Вторая (левая) КТ служила в качестве источника носителей заряда при протекании туннельного тока (см. рис.1.7). Если при манипуляции спина в правой КТ в режиме ЭДСР спин в ней приобретал проекцию, противоположную проекции спина в левой КТ, ток через всю структуру усиливался, т.к. электроны могли занимать состояния с противоположной проекций спина в правой КТ, в то время как при параллельной ориентации спина электроны не могут занимать одну и ту же область в пространстве в силу механизма спиновая блокадв Паули [76], и ток ослабевает. Следует отметить, что в работе [201], из которой взят рис.1.7., вторая (левая) КТ использовалась фактически в качестве источника электронов и не принимала участия в механизме собственно переворота спина. Движение электрона в правой КТ описывалось на языке периодического смещения Δx для среднего значения координаты (или центра тяжести волновой функции), которое в типичных условиях для КТ с линейным размером ~100 нм, эффективной массой m~0.1 m_0 и амплитуды потенциала периодического поля ~100 мкэВ составляет порядка 0.1...0.2 нм. Исходя из оценки для Δx , частоту Раби можно оценить как [152], [201]

$$\Omega_R = \frac{g\,\mu_B \,|\, \mathbf{B}_{\rm eff} \,|}{2\hbar},\tag{1.24}$$

где величина эффективного магнитного поля $|\mathbf{B}_{eff}|$, обусловленного СОВ, может быть связана с внешним магнитным полем B_z и амплитудой Δx как

$$|\mathbf{B}_{\rm eff}| = 2B_z \frac{\Delta x}{l_{SO}},\tag{1.25}$$

где $l_{SO} = \hbar^2 / m \alpha$ с точностью до множителя $\pi/2$ совпадает с длиной спиновой прецессии (1.12). Наши оценки при α=3 мэВ·нм дают для величины эффективного магнитного поля (1.25) значение $|\mathbf{B}_{\rm eff}| \sim 2 \cdot 10^{-3} B_z$, что для смещения ∆х ~0.1...0.2 нм приводит к оценке частоты Раби (1.16) в ~1/500 от частоты периодического поля. Для типичных значений магнитного поля в 0.1 Т и g-фактора g=1.35, используемых в недавних экспериментах [60], это означает время переворота спина $\tau_{\rm f} \sim 500~T = 110~$ нс, где $T \sim 0.22~$ нс есть период электрического поля. Таким образом, частота Раби переворота спина при ЭДСР согласно таким оценкам составляет $f_{\rm R} \sim 9~{\rm M}$ Гц, что согласуется с ранними данными работы [201] и более поздними экспериментами [60], [250]. Временная зависимость осцилляций тока через двойную КТ в экспериментах [201] вместе с зависимостью частоты Раби от амплитуды микроволнового поля показана на рис.1.8. Согласно (1.15) зависимость $\Omega_{\rm R}$ от амплитуды электрического поля Fявляется линейной, что имеет место в строго двухуровневой системе. В многоуровневой системе наблюдаются существенные отклонения от этой закономерности, что будет обсуждаться в главе 2 данной диссертации.



Рисунок 1.7. (А) Структура из двух туннельно связанных КТ, созданных полем затвора в двумерном электронном газе на основе GaAs, созданная для наблюдения ЭДСР. Левая КТ служит в качестве источника носителей заряда и спина при протекании туннельного тока, в правой КТ спин переворачивается под действием импульса периодического электрического поля на частоте (1.13), показанного на (С). Смещение минимума потенциала в правой КТ показано на (В). Если при манипуляции спина в правой КТ в режиме ЭДСР спин в ней приобретал проекцию, противоположную проекции спина в левой КТ, ток через всю структуру усиливался, т.к. электроны могли занимать состояния с противоположной проекций спина в правой КТ, в то время как при параллельной ориентации спина электроны не могут занимать одну и ту же область в пространстве в силу принципа Паули и ток ослабевает [201].

Схожие результаты по ЭДСР были получены и для структур с потенциалом двойной КТ, созданным полем затвора в нанопроволоке на основе InAs [198] и InSb [199] с большой амплитудой СОВ α ~10 мэВ·нм и большим g-фактором (|g|~ 9 в InAs и |g|~ 30 в InSb).



Рисунок 1.8. (А) Временная зависимость осцилляций тока через структуру с двойной КТ, показанную на рис.1.7, отвечающая частоте Раби переворота спина в одной из КТ. (В) Зависимость частоты Раби от амплитуды микроволнового поля, имеющая близкий к линейному вид [201].

Схема структуры из [199], которая схожа со схемой из работы [198], показана на рис.1.9. Можно видеть, что она имеет много общего со схемой из работы [201] на рис.1.7., в первую очередь в том, что орбитальное движение электрона между КТ имеет практически одномерный характер. Зависимость тока через структуру с двойной КТ от времени, полученная в работе [198], показана на рис.1.10. Сравнивая её с рис.1.8. из работы [201], можно отметить сходство получаемых характеристик. Отличия носят преимущественно количественный характер, в частности, в максимально достижимой частоте Раби на рис.1.10, составляющей около 60 MHz, что отвечает времени переворота спина $\tau_f \sim 17$ нс.

Эксперименты по измерению туннельного тока в структурах с двойной квантовой точкой проводились также в таких режимах и на плоскостях таких параметров, при которых проявлялись картины LZSM интерференции, подобно показанным на рис.1.6.



Рисунок 1.9. (a), (b) Схема структуры с двойной КТ на основе нанопроволоки из InSb с эффективным магнитным полем **B**_{SO} и (c) фотография структуры [199].



Рисунок 1.10. (d) Временная зависимость осцилляций тока через структуру с двойной КТ, показанную на рис.1.9, отвечающая частоте Раби переворота спина в одной из КТ. (e) Зависимость частоты Раби от амплитуды микроволнового поля, имеющая близкий к линейному вид. (f) Временная зависимость осцилляций тока для левой и правой КТ с разными значениями магнитного поля [198].

Остановимся на результатах работы [60], где изучался ток через структуру с двойной КТ на основе GaAs с дырочной проводимостью, помещённой в периодическое электрическое поле, которая показана на рис.1.11. Режим протекания тока в структуре на рис.1.11 носил существенно одноэлектронный характер, поэтому величина измеренного тока была пропорциональна вероятности туннелирования между КТ. Зависимости для усреднённой по времени амплитуды тока в плоскости (мощность периодического поля, detuning), аналогичные рис.1.6, показаны на рис.1.12 [60] для различных частот периодического поля.



Рисунок 1.11. Структура с двойной квантовой точкой (DQD) на основе двумерного дырочного газа в GaAs, использованная в экспериментах по LZSM интерференции при протекании тока [60].

Панели слева отвечают нулевому магнитному полю, панели справа – ненулевым значениям магнитного поля. Следует отметить (о чём автору диссертации сообщил один из авторов статьи [60] С.А. Студеникин), что на графиках есть опечатка в единицах тока: следует читать не nA, а pA (пA пикоамперы). На основе оценки амплитуды тока в pA можно сделать вывод, что в секунду через структуру с двойной КТ проходит около 6·10⁶ дырок, т.е. время эволюции одной дырки внутри структуры составляет около 200 нс, что достаточно для рассматриваемых в главе 2 задач динамики внутри двойной КТ.

Можно видеть, что для высоких частот электрического поля (6.7 ГГц и выше) наблюдаемая структура типа «воронка» (funnel) вдоль вертикальной оси (detuning) достаточно хорошо описывается многофотонными резонансами (1.23), а вдоль горизонтальной оси (мощность источника поля) периодическая структура обусловлена зависимостью функций Бесселя в (1.21) от амплитуды поля. В магнитном поле картина максимумов на правых панелях рис.1.12 является как бы двойной, что связано с наличием двух каналов туннелирования между КТ: с сохранением спина и с переворотом спина. Более подробно описание механизмов различных каналов туннелирования в структуре с двойной КТ с учётом спиновой

степени свободы, а также их взаимодействия, будет представлено в главе 2 при описании наших оригинальных задач для таких систем.



Рисунок 1.12. Зависимости для усреднённой по времени амплитуды тока в плоскости (мощность периодического поля, detuning), аналогичные рис.1.6, для структуры на рис.1.11, построенные для различных частот периодического поля. Панели слева отвечают нулевому магнитному полю, панели справа – ненулевым значениям магнитного поля [60].

Эксперименты с двойными КТ в режиме ЭДСР и его гармоник описаны и в других работах, см. [246], [250], [204], [187]. В работе [246] рассматривался режим ЭДСР в двойной КТ в нанопроволоке на основе InAs, где были экспериментально обнаружены субгармоники ЭДСР, которые можно видеть на рис.1.13. На этом рисунке из работы [246] показаны результаты измерения протекающего через двойную КТ тока в плоскости параметров (f, B), где f есть частота периодического поля и B есть индукция магнитного поля. Под

субгармоникой (или дробной гармоникой) ЭДСР мы понимаем резонансное явление, протекающее на частоте периодического электрического поля ω, удовлетворяющей условию

$$k \cdot \hbar \omega = \Delta_Z, \tag{1.26}$$

где $\Delta_Z = \mu_B g B$ есть зеемановское расщепление уровней, участвующих в резонансе, а k есть целое число. При k=1 условие (1.26) представляет собой условие обычного ЭДСР. Условие (1.26) на плоскости (f, B), показанной на рис.1.13, отвечает семейству прямых линий с разным углом наклона, определяемых g-фактором (разным в разных КТ на рис.1.13) и номером субгармоники k.



Рисунок 1.13. Карта интенсивности протекающего через двойную КТ тока в плоскости параметров (*f*, *B*), где *f* есть частота периодического поля и *B* есть индукция магнитного поля. Прямые линии, удовлетворяющие условию (1.26), отвечают субгармоникам ЭДСР с разным g-фактором в разных КТ [246].

Практическая значимость исследования субгармоник состоит в том, что резонанс на них протекает на частоте $\omega = \Delta_Z / (\hbar k)$, в k раз меньшей частоты зеемановского расщепления Δ_Z / \hbar , что позволяет применять для его реализации оборудование для меньших частот, если основная гармоника k=1 отвечает частоте, трудно достижимой в условиях данного эксперимента. Гармоники и субгармоники ЭДСР исследовались в ряде других работ, см. [220], [230], [275]. Субгармоники ЭДСР будут исследоваться нами в главе 2 с точки зрения управляемого переворота спина на частотах, удовлетворяющих условию (1.26).

Оцениваемое выше время переворота спина $\tau_{\rm f} \sim 110$ нс в работе [201] и $\tau_{\rm f} \sim 17$ нс в работе [198] может быть сравнимо или даже больше времени спиновой релаксации в структурах на основе GaAs, InAs или InSb [184], [92], [111]. Влияние

релаксации вместе с другими механизмами нарушения строго периодического характера осцилляций Раби заметно как на рис.1.8, так и особенно на рис.1.10, где наблюдается всего 4-5 вращений спина на временах до ~80 нс. Необходимо учитывать целый ряд различных механизмов релаксации, которые могут включать и взаимодействия спинов с фононами, и взаимодействие электронных и дырочных спинов с системой ядерных спинов кристаллической решётки. Это приводит к естественному желанию предсказать и обнаружить такие эффекты, где главная, наиболее полезная часть эволюции системы проходила бы на достаточно коротких временах, меньших типичных времён энергетической и спиновой релаксации. Представляет поэтому интерес нахождение таких режимов ЭДСР, при которых время переворота спина удалось бы существенно уменьшить, а частоту Раби (1.16) или (1.15), соответственно, увеличить. Поиску таких режимов в значительной степени посвящена глава 2 настоящей диссертации.

Интерес к структурам с двойной КТ, которые были использованы в ранних [201], [198], [199] и более поздних, в том числе с дырочными состояниями [60], [250], [204], [187], [97] экспериментах по ЭДСР, обусловлен также перспективами использования туннелирования между КТ для увеличения эффективности СОВ. Действительно, для эффективного воздействия с помощью СОВ на спин, которое приводит к углу поворота ~ л, его носитель должен пройти не слишком малое расстояние в пространстве, порядка длины спиновой прецессии (1.12). Если амплитуда СОВ невелика, то указанное расстояние может превысить длину свободного пробега фононах дефектах, из-за рассеивания на ИЛИ И упорядочивающее COB окажется нивелированным, влияние а картина когерентного вращения спина окажется возможной лишь на небольшом числе периодов, как это видно на рис.1.8 и особенно на рис.1.10. Применение структур с двойной квантовой точкой с сильным СОВ, в которых также эффективно туннелирование между КТ, увеличивает располагаемую дистанцию движения носителя спина за счёт туннелирования в соседнюю квантовую точку и обратно. Это, по нашему мнению, улучшает перспективы таких систем как структур с управлением спином посредством СОВ и электрического поля. Группа задач о

47

совместном рассмотрении туннелирования и ЭДСР в двойных КТ с сильным СОВ занимает центральное место в главе 2 диссертационной работы.

1.3. Сверхрешётки со СОВ и оптическая генерация спиновой плотности

Низкоразмерные протяжённые полупроводниковые структуры со СОВ исследовались на протяжении достаточно долгого времени. Наиболее естественным был переход от трёхмерного к двумерному электронному газу в КЯ и далее к (квази-) одномерному каналу, если имеется потенциал конфайнмента в одном из направлений в плоскости двумерного газа. При наличии СОВ, как и в двумерном газе, может наблюдаться расщепление зон с различной спиновой поляризацией в соседних зонах, что находит своё отражение в транспортных характеристиках. В центре внимания работ по квазиодномерным каналам со СОВ была зонная структура и полная либо спин-зависимая проводимость, т.е. такая проводимость, когда учитывается ток носителей с выделенной проекцией спина [194], [192], а также распределение спиновой плотности поперёк [115] или вдоль [78] канала. Помимо структур с однородным потенциалом вдоль канала, рассматривалась зонная структура и транспорт в сверхрешётках [39], [127], где имеется периодическая модуляция потенциала либо параметра СОВ вдоль канала [256], [257], [255], где также изучалась спиновая поляризация протекающего тока и аккумулирование спинов [157]. Также исследовались структуры с модуляцией параметров самого энергетического спектра, как, например, в работе [185] о периодической структуре в графене, где имеется пространственная периодическая модуляция щели Дирака, или системы с геометрией кольца, вдоль периметра которого параметр Рашбы меняется периодически [269].

Пример квазиодномерного канала ширины w с периодической последовательностью сегментов с различным параметром Рашбы α_i из работы [257] показан на рис.1.14. Сегмент длины l_1 имеет значение параметра Рашбы α_1 , следующий сегмент длины l_2 имеет значение параметра Рашбы α_2 и т.д., после некоторого числа сегментов периодическая последовательность возобновляется.



Рисунок 1.14. Квазиодномерный канал ширины w с периодической последовательностью сегментов с различным параметром Рашбы α_i . Сегмент длины l_1 имеет значение параметра Рашбы α_1 , следующий сегмент длины l_2 имеет значение параметра Рашбы α_2 , после некоторого числа сегментов периодическая последовательность возобновляется [257].

В работе [257] были рассмотрены структуры с конечным числом N групп сегментов. На рис.1.15(a), (b) из этой же работы показана зависимость проводимости в канале с двумя сегментами в периоде из этой же работы как функция длины сегмента l_2 с ненулевым параметром α_2 , при этом предыдущий сегмент длины l_1 имеет значение $\alpha_1=0$. На панели (а) для сплошной кривой длина l_1 фиксирована на 237.5 нм, а для точечной кривой она фиксирована на 200 нм. На панели (b) фиксирована сумма длин l₁+l₂=210 нм. Число групп сегментов (периодов структуры) N=8. На панели (с) показана зависимость проводимости от энергии электрона для структуры с N=8 и N=10 периодами с фиксированными длинами сегментов $l_1=135$ нм и $l_2=110$ нм. На всех рисунках можно видеть немонотонную зависимость проводимости от длины сегмента или от энергии электрона, в том числе можно видеть наличие областей с резко пониженной проводимостью, что отражает влияние СОВ на транспорт. Можно также отметить, что конечное число N сегментов лишь приблизительно описывает периодическую структуру, в которой волновая функция должна удовлетворять теореме Блоха.



Рисунок 1.15. Зависимость проводимости в канале с двумя сегментами в периоде (a), (b) как функция длины сегмента l_2 с ненулевым параметром α_2 , при этом предыдущий сегмент длины l_1 имеет значение α_1 =0. На (a) для сплошной кривой длина l_1 фиксирована на 237.5 нм, а для точечной кривой она фиксирована на 200 нм. На панели (b) фиксирована сумма длин $l_1+l_2=210$ нм. Число групп сегментов (периодов структуры) N=8. На панели (c) показана зависимость проводимости от энергии электрона для структуры с N=8 и N=10 периодами с фиксированными длинами сегментов $l_1=135$ нм и $l_2=110$ нм [257].

В работе [157] изучалась спиновая поляризация в одномерной сверхрешётке, созданной периодическим потенциалом V(x)=V(x+d) в двумерном электронном газе. Закон дисперсии в такой сверхрешётке с шириной минизоны Δ без учёта СОВ имел вид

$$\varepsilon(k_x, k_y) = \frac{\Delta}{2} \left(1 - \cos(k_x d) \right) + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}.$$
 (1.27)

СОВ Рашбы для сверхрешётки в базисе матрицы σ_z в работе [157] записывалось как

$$J(k_x, k_y) = \begin{pmatrix} 0 & J_{12}(k_x, k_y) \\ J_{12}^*(k_x, k_y) & 0 \end{pmatrix},$$
(1.28)

где
$$J_{12}(k_x,k_y) = \alpha m \left(i \frac{\Delta d}{2\hbar} \sin(k_x d) + \frac{\hbar k_y}{m} \right)$$
. В присутствии электрического поля Е

вдоль направления сверхрешётки Ox и с учётом времени релаксации импульса τ_s ненулевая *у*-компонента спиновой поляризации f_y вычислялась из решения

кинетического уравнения через недиагональные элементы матрицы плотности. Зависимость f_y от амплитуды электрического поля \mathcal{E} из работы [157] показана жирной сплошной линией на рис.1.16 для энергии Ферми ε_F =100 мэВ и ширины минизоны Δ =100 мэВ, при значении постоянной Рашбы α =50 мэВ·нм, периоде сверхрешётки d=6 нм, времени релаксации τ_s =1 пс и температуре T=4 К. Можно видеть, что спиновая поляризация имеет максимум при амплитуде поля \mathcal{E} , отвечающей условию

$$\Omega_{\rm s}\tau_{\rm s}=1, \qquad (1.29)$$

где $\Omega_s = e\mathcal{E}d$ есть частота Штарка (в системе с $\hbar = 1$), которому отвечает вертикальная черта на рис.1.16. Спадание поляризации при $\Omega_s \tau_s > 1$ обусловлено обычно локализацией электронных штарковских состояний в сверхрешётках в постоянном электрическом поле [39], [127]. Одним из главных результатов на рис.1.16 является то, что в слабых электрических полях при $\Omega_s \tau_s < 1$ поляризация в сверхрешётке существенно превосходит поляризацию в однородном двумерном электронном газе, которой отвечает пунктирная прямая линия на рис.1.16. Этот результат говорит о перспективности применения сверхрешёток со СОВ в качестве элементов, усиливающих спиновую поляризацию, в том числе в слабом электрическом поле. Мы обсудим более подробно зонную структуру одномерных COB сверхрешёток co И спиновую поляризацию В них, a также магнитооптические свойства двумерных сверхрешёток со СОВ в магнитном поле в главе 3 настоящей диссертации. В частности, будут обсуждаться стоячие волны спиновой плотности в сверхрешётке, для которых предполагается увеличение времени спиновой релаксации [206].



Рисунок 1.16. Зависимость спиновой поляризации f_y от амплитуды электрического поля \mathcal{E} показана жирной сплошной линией для энергии Ферми ε_F =100 мэВ и ширины минизоны Δ =100 мэВ, при значении постоянной Рашбы α =50 мэВ·нм, периоде сверхрешётки d=6 нм, времени релаксации τ_s =1 пс и температуре T=4 К. Спиновая поляризация имеет максимум при амплитуде поля \mathcal{E} , отвечающей условию $\Omega_s \tau_s$ =1, которому отвечает вертикальная черта, где Ω_s есть частота Штарка. В слабых электрических полях при $\Omega_s \tau_s$ <1 поляризация в сверхрешётке существенно превосходит поляризацию в однородном двумерном электронном газе, которой отвечает пунктирная прямая линия [157].

Задачи о взаимодействии зарядовых и спиновых степеней свободы электронов и дырок в полупроводниковых структурах с электромагнитным излучением образуют обширное направление исследований, в котором уже выделились отдельные направления, связанные со спин-зависимыми эффектами. Возникло целое направление, называемое спиновой фотогальваникой. Были предсказаны и обнаружены циркулярный фотогальванический эффект, спин-гальванический эффект, обратный спин-гальванический эффект [128], [184], [92]. С учётом наших целей в главе 3 диссертации мы остановимся здесь лишь на эффекте генерации спиновой поляризации в полупроводнике присутствии СОВ при поглощении линейно поляризованного излучения, рассмотренного в [59]. Спиновая поляризация в *k*-пространстве $\vec{S}(\vec{k})$ рассчитывается при решении

оптических уравнений Блоха для матрицы плотности в первом порядке по интенсивности излучения [6], [223], [59], т.е. по $|E_{\omega}|^2$, где E_{ω} есть амплитуда электрического поля на частоте ω . Если *j*-я компонента электрического поля описывается несущей частотой ω и медленно меняющейся огибающей $E_{\omega}^{j}(t)$ (которая может быть и постоянной для монохроматического поля), то решение для матрицы плотности имеет вид [59]

$$\rho_{nm}(t) = \rho_{nm}(0) + \sum_{v \to \infty} \int_{-\infty}^{t} dt' \frac{\vec{E}_{\omega}(t') \cdot \vec{v}_{nv}}{\omega_{nv}} \frac{\vec{E}_{\omega}^{*}(t') \cdot \vec{v}_{vm}}{\omega_{mv}} \times \frac{\pi e^{2}}{\hbar^{2}} e^{(-i\omega_{nm} - \gamma_{nm})(t-t')} \left(D_{nv} + D_{mv}^{*}\right),$$
(1.30)

где $\hbar \omega_{cv}(\vec{k}) = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k})$, а $\vec{v}_{nv}(\vec{k})$ есть матричные элементы оператора скорости $v^l = \partial H/\partial(\hbar k_l)$, который для гамильтониана со СОВ содержит и спиновые операторы. Параметр γ_{HM} обозначает скорость дефазировки для недиагональных матричных элементов, а $D_{nv} = \delta(\omega - \omega_{nv}) - (i/\pi)P(\omega - \omega_{nv})^{-1}$, где Pобозначает главную часть интеграла. С помощью матрицы плотности индуцированная плотность заряда в k-пространстве вычисляется как

$$N(\vec{k}) = \sum_{c} \rho_{cc,\vec{k}} , \qquad (1.31)$$

а спиновая плотность вычисляется как

$$S^{i}(\vec{k}) = \sum_{j,l} \xi^{ijl}(\vec{k}) \int_{-\infty}^{t} E_{\omega}^{j*}(t') E_{\omega}^{l}(t') dt', \qquad (1.32)$$

где

$$\xi^{ijl}(\vec{k}) = \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \omega^2} \frac{1}{V} \sum_{v,c \neq c'} \left\langle c' \vec{k} \mid S^i \mid c \vec{k} \right\rangle v_{vc'}^j(\vec{k}) v_{cv}^l(\vec{k}) \times \left[\delta \left(\omega_{cv}(\vec{k}) - \omega \right) + \delta \left(\omega_{c'v}(\vec{k}) - \omega \right) \right]$$
(1.33)

Результаты расчёта из работы [59] для индуцированной полем на частоте ω плотности заряда $N_{\omega}(\vec{k})$ в (1.31) в виде угловой зависимости $n(\theta, \varphi) = \sum_{|\vec{k}|} N_{\omega}(\vec{k})$ и спиновой плотности (1.32) в виде векторного поля $\vec{s}(\theta, \varphi) = \sum_{|\vec{k}|} \vec{S}(\vec{k}) / n(\theta, \varphi)$ со

стрелками на поверхности $n(\theta, \varphi)$ показаны на рис.1.17 для образца GaAs (a) без учёта напряжений с избыточной энергией фотона 300 мэВ и (b) при учёте 1% растягивающих и (c) сжимающих напряжений и избыточной энергии фотона 20 мэВ. Можно видеть, что во всех точках *k*-пространства формируется рисунок спиновой плотности, причём её максимальная величина по амплитуде на панели (c) достигает 44% в единицах $\hbar/2$. Можно сделать вывод, что взаимодействие полупроводника с сильным COB с электромагнитным излучением является достаточно эффективным для генерирования локальной спиновой плотности в *k*-пространстве. Представляет поэтому интерес задача о генерации спиновой плотности и в координатном пространстве на периодах сверхрешётки, которая будет рассматриваться в главе 3 настоящей диссертации.



Рисунок 1.17. Индуцированная электромагнитным полем плотность заряда в форме угловой зависимости $n(\theta, \varphi) = \sum_{|\vec{k}|} N_{\omega}(\vec{k})$ и спиновой плотности $\vec{s}(\theta, \varphi) = \sum_{|\vec{k}|} \vec{S}(\vec{k})$ для GaAs (a) без учёта напряжений с избыточной энергией фотона 300 мэВ и (b) при учёте 1% растягивающих и (c) сжимающих напряжений и избыточной энергии фотона 20 мэВ. Во всех точках *k*-пространства формируется рисунок спиновой плотности, её максимальная величина по амплитуде на панели (c) достигает 44% в единицах $\hbar/2$ [59].

1.4. Решётка из атомов висмута на подложке из кремния как структура с гигантским СОВ

Примерами материалов с очень большой величиной расщепления зон, обусловленным СОВ, являются комбинированные структуры, представляющие собой, например, сплав Ві и Ад на подложке из Ад и Si [101], а также структуру с

монослоем атомов висмута, выращенного на подложке из кремния. Остановимся на последней структуре более подробно. Она исследовалась в ряде работ [121], [122], [109], её зонная структура была исследована методами спектроскопии с угловым разрешением (ARPES). Пространственное положение атомов висмута и атомов кремния показано на рис.1.18 из работы [109], где атомы кремния показаны синим цветом, а атомы висмута – красным цветом. Может быть реализована конфигурация в фазе мономера (альфа-фазы) на панели (а) либо тримера (бета-фазы) на панели (b). Фаза тримера имеет меньше элементов симметрии и поэтому ожидается, что она произведёт большее спиновое расщепление. Зонная структура такой системы, измеренная методами ARPES, показана на рис.1.19 для направления $\overline{\Gamma M}$ в поверхностной зоне Бриллюэна. Расщепление зон можно наблюдать как светлые промежутки между тёмными линиями.



Рисунок 1.18. Расположение атомов висмута (красные шары) и кремния (синие шары) в фазе (а) мономера (альфа-фазы) и (b) тримера (бета-фазы), формирующейся при выращивании монослоя атомов висмута на подложке из кремния. [109].



Рисунок 1.19. Зонная структура системы с монослоем висмута на подложке кремния, полученная методами ARPES и показанная вдоль направления $\overline{\Gamma M}$ в поверхностной зоне Бриллюэна Расщепление зон вблизи точки \overline{M} имеет вид спектра с СОВ Рашбы на рис.1.1 с амплитудой расщепления 140 мэВ [109].

Расщепление зон на рис.1.19 вблизи точки \overline{M} имеет вид расщепления в спектре с COB Рашбы на рис.1.1. Авторы работы [109] оценили его в 140 мэВ, что значительно (почти на порядок) превосходит индуцированное COB расщепление в обычных полупроводниковых низкоразмерных структурах. Это дало основания считать материал с монослоем висмута на кремнии перспективным для спинтроники в силу большого COB-индуцированного расщепления.

Теоретическая модель зонной структуры для монослоя висмута на кремнии была разработана в работе [102] той же группы, что участвовала в экспериментальной работе [109]. Она основана на приближении почти свободных электронов и учитывает три вектора обратной решётки \vec{G}_1 , \vec{G}_2 , \vec{G}_3 , соединяющих четыре эквивалентные Γ -точки $\Gamma^{(0)}$ – $\Gamma^{(3)}$ в поверхностной гексагональной зоне Бриллюэна, как это показано на рис.1.20. Геометрические параметры шестиугольника на рис.1.20 по расстояниям от Γ -точки до *М*-точки и до *К*-точки следующие ([102]): $\overline{\Gamma M} = 5.4$ нм⁻¹, $\overline{\Gamma K} = 6.2$ нм⁻¹.



Рисунок 1.20. Поверхностная гексагональная зона Бриллюэна для монослоя висмута на подложке кремния. В модели (1.32) учитываются три вектора обратной решётки \vec{G}_1 , \vec{G}_2 , \vec{G}_3 , соединяющих четыре эквивалентные Γ -точки $\Gamma^{(0)}$ – $\Gamma^{(3)}$. Геометрические параметры шестиугольника по расстояниям от Г-точки до *М*-точки и до *К*-точки: $\overline{\Gamma M} = 5.4$ нм⁻¹, $\overline{\Gamma K} = 6.2$ нм⁻¹ [102].

Соответствующая матрица гамильтониана имеет структуру 4х4 из блоков 2х2:

$$H = \begin{vmatrix} H_0(k) & V_{01} & V_{02} & V_{03} \\ & H_0(\vec{k} + \vec{G}_1) & V_{12} & V_{13} \\ & & H_0(\vec{k} + \vec{G}_2) & V_{23} \\ & & & H_0(\vec{k} + \vec{G}_3) \end{vmatrix},$$
(1.34)

где каждый блок 2x2 содержит слагаемое с эффективной массой и вклад от CBO Рашбы, имея вид

$$H_{0}(\vec{k}) = \begin{vmatrix} \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} & \alpha_{R}(k_{y} + ik_{x}) \\ \alpha_{R}(k_{y} - ik_{x}) & \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m} \end{vmatrix}.$$
 (1.35)

Недиагональные блоки вида

$$V_{01} = \begin{vmatrix} V_{G_1} & 0 \\ 0 & V_{G_1} \end{vmatrix}$$
(1.36)

в (1.34) описывают взаимодействие между плоскими волнами в обычной формулировке модели почти свободных электронов с Фурье-компонентами V_{G_i} периодического потенциала решётки

$$V(\vec{r}) = \sum_{i} V_{G_i} e^{i\vec{G}_i\vec{r}} .$$
(1.37)

Пример спектра гамильтониана (1.42) из работы [102] показан на рис.1.21. Можно видеть, что спектр на этом рисунке удовлетворительно описывает основные черты экспериментально полученного спектра на рис.1.19 вблизи спинового расщепления у точки \overline{M} , хотя полного соответствия для рассмотренной простой модели (1.38) не наблюдается.



Рисунок 1.21. Пример зонной структуры в модели (1.38) почти свободных электронов для монослоя висмута на подложке кремния в направлении $\overline{\Gamma}^{(0)} - \overline{M} - \overline{\Gamma}^{(1)}$. Кривые разного цвета описывают расщеплённые по спину зоны, направления спина в которых показаны стрелками [102].

В главе 3 настоящей диссертации мы рассмотрим обобщение модели (1.38) с более полным базисом в k-пространстве, включающим не три, а шесть векторов обратной решётки, соединяющих семь эквивалентных Γ -точек, показанных на рис.1.20. Кроме того, будет рассмотрен отклик этой структуры на постоянное электрическое и переменное электромагнитное поле. Наконец, в главе 4

диссертации будут рассмотрены краевые состояния, наличие и свойства которых говорит о возможности присутствия у материала с монослоем атомов висмута на подложке кремния признаков топологического изолятора, краткий обзор которых представлен ниже в п.1.6. Рассматриваемая система, фазы которой в последние годы классифицируется как альфа (мономер)- и бета (тример)-фазы Bi/Si(111), изучалась экспериментально и теоретически в недавней работе [188], где была обнаружена нетривиальная картина спиновой поляризации в зоне Бриллюэна.

1.5. Оптические свойства квантовых ям с монослоем магнитных примесей вблизи ямы

Задачи об интегрировании полупроводниковых и магнитных структур привлекают внимание в течение нескольких последних десятилетий [277], [23], [123], в том числе для создания спиновых светоизлучающих диодов [18]. Их исследование составляет самостоятельную ветвь спинтроники, в которой нас будет интересовать сравнительно узкий раздел, связанный со спин-зависимыми оптическими свойствами квантовых ям, вблизи которых находится слой ферромагнитных атомов. Известно, что оптически индуцированные носители взаимодействовать заряда могут с магнитными моментами атомов ферромагнетика, что обуславливает взаимное влияние их спиновой ориентации [203], [197], [23], [162], [170]. Нас будет интересовать ещё более узкий круг задач, связанных с оптически индуцированным взаимодействием спинов электронов, дырок и ферромагнитных атомов в системе, где ферромагнетик представляет собой узкую, близкую по толщине к монослою часть структуры, отделённую спейсером на 5-10 нм от квантовой ямы, в которой оптически возбуждаются и рекомбинируют поляризованные по спину электроны и дырки. Такая схема, рассмотренная ещё два десятилетия назад [197], позволяет достичь высокой степени поляризации излучения фотолюминесценции из квантовой ямы, которая определяется как

$$P = \frac{I^+ - I^-}{I^+ + I^-},$$
 (1.38)

где I^{\pm} есть интенсивности фотолюминесценции с правой (+) и левой (-) циркулярной поляризацией. Схема структуры и некоторые результаты из работы [197] показаны на рис.1.22.



Рисунок 1.22. (а) Схема структуры, где слой магнитного полупроводника MnAs отделён от KЯ GaAs шириной 7.5 нм спейсером из $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ толщины 5 или 9 нм в зависимости от образца. (b) Намагниченность M и поляризация фотолюминесценции P как функция приложенного магнитного поля. (c) Намагниченность как функцию температуры. (d) Спектры фотолюминесценции и степень поляризации как функция энергии фотона для различных значений магнитного поля [197].

На панели (а) рис.1.22 показана схема структуры, где слой магнитного полупроводника MnAs отделён от KЯ GaAs шириной 7.5 нм спейсером из $Al_{0.4}Ga_{0.6}As$ толщины 5 или 9 нм в зависимости от образца. Панель (b) показывает намагниченность M и поляризацию фотолюминесценции P как функцию приложенного магнитного поля, панель (c) показывает намагниченность как функцию температуры, панель (d) показывает спектры фотолюминесценции и степень поляризации как функцию энергии фотона для различных значений магнитного поля. Поляризация фотолюминесценции, как это видно на панели (d), следует за намагниченностью магнитного слоя. Это говорит о том, что

фотовозбуждённые носители в КЯ становятся поляризованными по спину из-за взаимодействия с магнитным слоем. Взаимодействие между спинами носителей (тяжёлых дырок) в КЯ и спинами в магнитном слое авторами работы [197] наблюдалось вплоть до толщины спейсера 10.7 нм, что связывалось с перекрытием соответствующих волновых функций, т.е. с обменным характером. Наличие магнитного слоя играет ключевую роль в получении заметной степени поляризации излучения фотолюминесценции, как это видно на рис.1.23 из той же работы [197], где интенсивность фотолюминесценции и степень поляризации отложены в координатах (энергия фотона, напряжение на затворе).



Рисунок 1.23. Интенсивность фотолюминесценции (верхние панели) и степень поляризации (нижние панели) в координатах (энергия фотона, напряжение на затворе). В контрольном образце без магнитного слоя на (а) поляризации фотолюминесценции (1.38) не наблюдается, в том время как на образце с магнитным слоем на нижней правой панели (b) наблюдается до 8% степени циркулярной поляризации [197].

Именно, если магнитный слой отсутствует, как это имеет место для контрольного образца на левых панелях (а), то не наблюдается и поляризации фотолюминесценции (1.38), в том время как на образце с магнитным слоем на нижней правой панели (b) наблюдается до 8% степени циркулярной поляризации.

Ещё одна структура, показанная на рис.1.24(а) из работы [162], имела магнитный слой GaMnAs толщины 1 нм, расположенный после спейсера толщиной в 2–10 нм вблизи КЯ из InGaAs. Эта структура исследовалась при

облучении линейной поляризованным излучением лазера, вызывающем межзонные переходы. При наличии магнитного поля В=0.1 Т в силу близости к GaMnAs происходила поляризация фотовозбуждённых магнитному слою носителей по спину, что приводило к наличию поляризации излучения фотолюминесценции. Спектр излучения фотолюминесценции (чёрная линия) и степень его поляризации (красная линия) показаны на рис.1.24(b). Можно видеть, что максимальная степень поляризации фотолюминесценции составляет около 4-5%.



Рисунок 1.24. (а) Структура с магнитным слоем GaMnAs на расстоянии 2–10 нм от КЯ InGaAs. (b) Спектр излучения фотолюминесценции (чёрная линия) и степень его поляризации (красная линия) [162].

Для приложений в спинтронике желательна более высокая степень циркулярной поляризации излучения фотолюминесценции. Поэтому работы в этом направлении продолжаются. Мы остановимся на недавних работах [51], [193]. В работе [51] исследовалась структура с монослоем атомов марганца на расстоянии d=3...8 нм вблизи КЯ $In_{0.16}Ga_{0.84}As$, в которой основными (резидентными) носителями являются дырки.



Рисунок 1.25. Структура с монослоем атомов марганца (δ_{Mn}) на расстоянии *d*=3...8 нм вблизи КЯ In_{0.16}Ga_{0.84}As, в которой основными (резидентными) носителями являются дырки [51].

Структура из работы [51] показана на рис.1.25, где δ_{Mn} обозначает монослой марганца. В отсутствии магнитного поля структура облучалась импульсами лазера циркулярной поляризации, вызывающего межзонные переходы с рождение поляризованной по спину пары электрон-дырка. Лалее наблюдалась рекомбинация с циркулярно поляризованной фотолюминесценцией. Для одного импульса с поляризацией σ^+ (правая круговая поляризация) детектировалась, соответственно, доминирующая поляризация фотолюминесценции также вида σ^+ , как это показано на рис.1.26(а) в виде чёрной кривой. При этом также наблюдалась менее интенсивная поляризация σ – (левая круговая поляризация), показанная красной кривой. Она наблюдается вследствие наличия резидентных носителей в КЯ с различной проекцией спина, а также процессов спиновой релаксации прежде всего для дырок, которая приводит к появлению дырок с противоположной проекцией спина. Далее обе интенсивности фотолюминесценции спадают во времени в ходе рекомбинации и спиновой релаксации электронов и дырок.

63



Рисунок 1.26. Зависимость от времени для (а), (b) интенсивности фотолюминесценции циркулярно поляризованного излучения и (c) степени циркулярной поляризации (1.38) для структуры на рис.1.25. Панель (а) и синяя кривая на панели (c) отвечают одиночному σ^+ поляризованному импульсу лазера, панель (b) и зелёная кривая на панели (c) отвечают последовательности из σ^- и σ^+ поляризованных импульсов лазера. После первого импульса остаточная поляризация в слое Mn воздействует на поляризацию дырок в KЯ, снижая степень поляризации после второго импульса, что составляет эффект «спиновой памяти» [51].

Соответствующая степень циркулярной поляризации (1.38) показана в виде последовательности синих кружков на панели (с) справа на рис.1.26. Она достигает 45%, что является весьма высоким показателем. Более сложная картина динамики фотолюминесценции наблюдается при последовательном воздействии двумя импульсами лазера с противоположной циркулярной поляризацией, что показано на панели (b) рис.1.26. Если первый импульс имел поляризацию σ^- , то в качестве ответа доминирует σ^- поляризованная фотолюминесценция (красная кривая на панели (b), первый пик слева). Она сопровождается небольшим пиком σ^+ поляризованной фотолюминесценции (черная кривая на панели (b), первый поляризации, показанная справа на панели (с), доходит до 45% со знаком минус. После этого поступает второй импульс от

лазера, на этот раз с поляризацией σ^+ . Ему отвечает пик фотолюминесценции с σ^+ поляризацией (второй пик на чёрной кривой на панели (b) рис.1.26), сопровождаемый меньшим по высоте пиком фотолюминесценции с σ^- поляризацией (второй пик на красной кривой на панели (b)). Схожие с показанными на рис.1.26 зависимости циркулярной поляризации наблюдались в эксперимаентах с квантовыми точками на основе InP, в которых эффект «спиновой памяти» обуславливался долгоживущей ориентацией спинов электронов [129].

Особенность показанных на рис.1.26 результатов состоит в том, что при наличии монослоя атомов Mn вблизи KЯ интенсивность второго меньшего (красная линия) пика на панели (b) гораздо выше, чем первого меньшего (чёрная линия). Это приводит к снижению степени циркулярной поляризации после второго пика по модулю с 45% до 25%, как это видно на положительной части зелёной кривой на панели (c). Эта особенность является следствием более долго живущей поляризации по спину атомов марганца, которые сохраняют свою поляризацию после первого импульса и поэтому влияют на поляризацию после второго импульса. Этот эффект из работы [51] можно назвать эффектом «спиновой памяти», что уже упоминалось в более ранней работе [203]. Теоретическая модель динамики фотолюминесценции с учётом оптической генерации электронно-дырочных пар, их взаимодействия со спинами магнитного слоя и рекомбинации должна включать построение и решение кинетических уравнений вида [233], [234]

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \gamma_{ij} N_j + G_i(t) \tag{1.39}$$

для спин-зависимых концентраций N_i носителей различного сорта (дырки, электроны, магнитные атомы) с различной проекцией спина, в которые входят скорости генерации/релаксации γ_{ij} и источники генерации G_i от падающего лазерного излучения. Для магнитных атомов, суммарное число которых Nm при генерации и рекомбинации эле $Nm_1+Nm_2=Nm$. Модель вида (1.39) будет построена

1 . .

для описания экспериментов со структурой с электронами в качестве резидентных носителей в КЯ [90] в заключительном разделе главе 3 настоящей диссертации.

1.6. Топологические изоляторы

1.6.1. Модель ВНZ

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой такое сочетание зонных и транспортных свойств в твердотельной, обычно полупроводниковой структуре, в котором объёмные состояния отвечают изолятору, где уровень Ферми находится в запрещённой зоне, а на крае существуют хорошо проводящие поверхностные (в трёхмерных ТИ) или одномерные (в двумерных ТИ) состояния. ТИ стали активно изучаться в начале 2000-х годов в работах Кейна и Меле [130], [131], в работах группы Берневига, Хьюза и Жанга [57], в работах группы Моленкампа [169] и других авторов. К настоящему времени библиография по ТИ насчитывает сотни статей, обзоров и монографий, среди которых можно упомянуть часто цитируемые обзоры [120], [209] и монографию [58]. Одним из представителей семейства двумерных ТИ, чья структура схожа с рассматриваемой в главе 3 системой бета-фазы слоя висмута на кремнии, является висмутен на подложке карбида кремния, признаки хорошо проводящих краевых состояний в котором обнаружены экспериментально [217].

Наиболее простым примером является двумерный ТИ на базе КЯ CdTe/HgTe/CdTe, в которой при превышении толщиной ямы d некоторого значения d_c возникает так называемая инвертированная зонная структура, когда первый уровень размерного квантования тяжёлых дырок H1 лежит выше первого уровня размерного квантования электронов E1, как это показано на рис.1.27. При $d < d_c$ расположение уровней обычное, а при $d > d_c$ – инвертированное. Значение d_c равно приблизительно 6.3 нм. Соответствующая модель зонной структуры названа моделью BHZ по первым буквам фамилий авторов Bernevig, Hughes, Zhang и представлена в статье [57]. Положение уровней E1 и H1 в зависимости от толщины ямы d показано на рис.1.28(A), взятом из этой же работы.

Гамильтониан ВНZ для двумерных состояний $\vec{k} = (k_x, k_y)$ в КЯ записывается в базисе четырёх функций, включающих электронные и дырочные состояния нижних зон размерного квантования с проекцией момента m_J , которые вносят определяющий вклад: |E1, $m_J=1/2$ >, |H1, $m_J=3/2$ >, |E1, $m_J=-1/2$ >, |H1, $m_J=-3/2$ >, в котором он имеет следующий вид:



Рисунок 1.27. Инвертированная зонная структура в КЯ CdTe/HgTe/CdTe, когда первый уровень размерного квантования тяжёлых дырок H1 лежит выше первого уровня размерного квантования электронов E1. При $d < d_c$ (слева) расположение уровней обычное, а при $d > d_c$ (справа) – инвертированное [57].

$$H_{BHZ} = \begin{vmatrix} H(\vec{k}) & 0 \\ 0 & H^*(-\vec{k}) \end{vmatrix}, \quad H(\vec{k}) = \begin{vmatrix} \varepsilon(k) + M(k) & Ak_- \\ Ak_+ & \varepsilon(k) - M(k) \end{vmatrix}, \quad (1.40)$$

где $\varepsilon(k)=C-Dk^2$, $M(k)=M-Bk^2$, $k_{\pm}=k_x \pm ik_y$, а параметры *A*, *B*, *C*, *D*, *M* зависят от характеристик материала и размеров КЯ. «Массовый» параметр *M* меняет свой знак с положительного на отрицательный при увеличении ширины ямы от $d < d_c$ к $d > d_c$, что и определяет инвертированный характер спектра. Закон дисперсии для гамильтониана (1.40) имеет изотропный по направлению квазиимпульса вид [57], [209]:

$$E_{1,2}(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) \pm \sqrt{A^2 k^2 + M^2(k)}, \qquad (1.41)$$

где $\varepsilon(k) = C - Dk^2$ и $M(k) = M - Bk^2$. Его иллюстрирует рис.1.28(В), где на трёх панелях для толщины ямы d=4, 6.34 и 7 нм более светлый оттенок поверхности $\varepsilon = \varepsilon(k)$ отвечает доминирующему вкладу дырочных состояний H1, а более тёмный оттенок – электронным состояниям Е1. Видно, что при $d>d_c$ светлый оттенок

вблизи k=0 перемещается в верхнюю зону, что отвечает инвертированной зонной структуре.



Рисунок 1.28. (А) Положение уровней Е1 и Н1 в модели ВНZ зависимости от толщины ямы d. При $d>d_c$, где $d_c=65.35$ нм, уровень дырок Н1 лежит выше уровня электронов Е1, образуя инвертированную зонную структуру (см. также рис.1.27). (В) Закон дисперсии для двумерных состояний в КЯ для толщины ямы d=4, 6.34 и 7 нм. Более светлый оттенок поверхности $\varepsilon=\varepsilon(k)$ отвечает доминирующему вкладу дырочных состояний Н1, а более тёмный – электронным состояниям Е1. При $d>d_c$ светлый оттенок вблизи k=0 перемещается в верхнюю зону, что отвечает инвертированной зонной структуре [57].

1.6.2. Краевые состояния в модели ВНZ

В модели ВНZ для двумерного ТИ существуют краевые состояния, делокализованные вдоль одномерного края и локализованные в поперечном направлении, т.е. «прижатые» краю [169], [274], [209]. В моделях трёхмерных ТИ, среди которых часто рассматриваются ТИ на базе соединений Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 аналогичные краевые состояния являются двумерными [176], [182], [209]. Рассмотрим вначале краевые состояния в модели ВНZ. Пусть в двумерной структуре имеется край *x*=0, разграничивающий область ТИ при *x*>0 и вакуум либо очень широкозонный полупроводник при *x*<0. Последнее означает, что в самом простом случае принимается приближение так называемых открытых граничных условий, при которых волновая функция краевого состояния практически не проникает в область x<0 и можно считать, что $\psi(0, y)=0$. Гамильтониан BHZ (1.40) можно разбить на сумму $H_{BHZ}=H_0+H_1$, где H_0 зависит только от k_x , а H_1 зависит только от k_y . Вначале ищут волновые функции при $k_y=0$. Собственная функция гамильтониана BHZ имеет вид четырёхкомпонентного спинора $\Psi(x)$, в который входит двухкомпонентная функция $\psi(x)=(\psi_1, \psi_2)$:

$$\Psi_{\uparrow}(x) = \begin{pmatrix} \psi(x) \\ \vec{0} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\downarrow}(x) = \begin{pmatrix} \vec{0} \\ \psi^*(x) \end{pmatrix}, \quad (1.42)$$

После замены в гамильтониане BHZ k_x на $-i\partial/\partial x$, для двухкомпонентной функции $\psi(x)=(\psi_1,\psi_2)$ получается уравнение [209], [153]

$$\left[\widetilde{\varepsilon}\left(-id/dx\right)\hat{\mathbf{l}} + \begin{pmatrix}\widetilde{M}\left(-id/dx\right) & -iAd/dx\\ -iAd/dx & -\widetilde{M}\left(-id/dx\right)\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_1\\\psi_2\end{pmatrix},$$
(1.43)

где $\tilde{\varepsilon} = C - Dk_x^2$ и $\tilde{M} = M - Bk_x^2$. Волновая функция $\psi(x) = (\psi_1, \psi_2)$ ищется в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \exp(\lambda x), \qquad (1.44)$$

где λ есть обратная глубина локализации волновой функции. После подстановки (1.44) в (1.43) получается характеристическое уравнение, связывающее λ с энергией состояния *E*. Для энергии краевого состояния *E*=0 два его решения имеют вид [209]

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2B} \left(A \pm \sqrt{A^2 - 4MB} \right). \tag{1.45}$$

Общее решение является суммой частных решений вида (1.44) с показателями $\lambda_{1,2}$ из (1.45) и коэффициентами, которые выбираются для удовлетворения граничному условию удовлетворяющими $\psi(0)=0$. Это приводит к решению

$$\psi(x) = \begin{cases} a(e^{\lambda_1 x} - e^{\lambda_2 x})\phi_-, & A/B < 0\\ c(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x})\phi_+, & A/B > 0, \end{cases}$$
(1.46)

где ϕ_{\pm} есть двухкомпонентные спиноры (1, $\pm i$) - собственные функции матрицы Паули σ_y . Из (1.46) можно сделать вывод, что длина локализации состояния определяется выражением $l_c = \max\{1/|\text{Re } \lambda_{1,2}|\}$. Для типичных параметров КЯ HgTe/CdTe эта длина имеет порядок 20-50 нм [274], [209].

Для краевых состояний можно получить эффективный гамильтониан, проектируя гамильтониан ВНZ (1.40) на базис из двух краевых состояний (1.42):

$$H_{edge}^{\alpha\beta}(k_{y}) = \left\langle \Psi_{\alpha} \mid H_{BHZ} \mid \Psi_{\beta} \right\rangle, \qquad (1.47)$$

что приводит к гамильтониану с матрицей 2х2, имеющему вид

$$H_{edge}(k_{v}) = Ak_{v}\sigma_{z}, \qquad (1.48)$$

где для КЯ HgTe/CdTe параметр A=360 мэВ·нм [169], [209]. Этот параметр определяет скорость краевых состояний $v = A/\hbar$, составляющую $5.5 \cdot 10^7$ см/с. Гамильтониан (1.48) будет отправной точкой для построения модели краевых состояний в присутствии магнитных барьеров, которая рассматривается в главе 4 данной диссертации. Его спектр представляет собой две ветви с линейным законом дисперсии

$$E_{\pm}(k_{\nu}) = \pm Ak_{\nu}, \qquad (1.49)$$

а собственные функции есть плоские волны, умноженные на двухкомпонентные спиноры – собственные функции матрицы σ_z . Ветви закона дисперсии (1.49) располагаются в запрещённой зоне объёмного материала, как это показано на рис.1.29 [209], где сплошной набор тёмных линий представляет собой спектр объёмных состояний гамильтониана ВНZ (1.40) для полосы конечной ширины [274], [209], а в запрещённой зоне существуют две ветви краевых состояний с линейным законом дисперсии (1.49). На панели (b) показан спектр при $d > d_c$, когда В запрещённой зоне появляются краевые состояния с эффективным гамильтонианом (1.48). На каждой из ветвей спектра значение проекции спина постоянно, $\sigma_{z\pm} = \pm 1$, и не зависит от квазиимпульса, как и групповая скорость $v_{y\pm} = \partial E_{\pm} / \partial (\hbar k_y) = \pm A / \hbar$. Таким образом, краевые состояния ветви E_{\pm} движутся вправо с групповой скоростью $v_{y+} = A/\hbar$ независимо от k_y , что отражается в

постоянном красном цвете на линейном законе дисперсии на рис.1.29, а состояния ветви E_{-} движутся влево с групповой скоростью $v_{y_{-}} = -A/\hbar$, что описывается прямой линией синего цвета на рис.1.29.



Рисунок 1.29. Спектр в модели ВНZ для полосы конечной ширины как функция квазиимпульса *k* вдоль её края. Сплошной набор тёмных линий представляет собой спектр объёмных состояний гамильтониана ВНZ (1.48), а в запрещённой зоне существуют две ветви краевых состояний (красная и синяя линии) с линейным законом дисперсии (1.49) [209].

1.6.3. Экспериментальные результаты для краевых состояний в двумерных ТИ

Исторически первые экспериментальные результаты были получены по двумерным ТИ практически одновременно с теоретическим описанием [169], [209]. Структура, исследованная в [169], показана на рис.1.30. Область квантовой ямы HgTe, на крае которой формируются одномерные краевые состояния, дающие существенный вклад в проводимость, показана жёлтым цветом.



Рисунок 1.30. Структура с КЯ HgTe (жёлтый цвет), в которой были обнаружены признаки наличия хорошо проводящих краевых состояний в фазе ТИ [169].

Зависимость продольного сопротивления R_{xx} от напряжения затвора V_g показана на рис.1.31. Область большого сопротивления в середине графика отвечает режиму изолятора для объёмных состояний, когда уровень Ферми находится в запрещённой зоне. Если толщина КЯ HgTe $d < d_c$, продольное сопротивление образца соответствует именно такому тривиальному изолятору (чёрная кривая на рис.1.31). Для более широких КЯ при $d > d_c$, когда формируется фаза ТИ, продольное сопротивление R_{xx} (красная кривая на рис.1.31) падает на два порядка. Авторы работы [169] связывают это с формированием хорошо проводящих ток краевых состояний, являющихся отличительным признаком ТИ. Доказательство наличия протяжённых краевых состояний в [169] состоит также в независимости продольного сопротивления от ширины образца в режиме ТИ, когда объёмные состояния не вносят существенного вклада в проводимость, как это показано на рис.1.32.


Рисунок 1.31. Зависимость продольного сопротивления R_{xx} от напряжения затвора V_g . Область большого сопротивления в середине графика отвечает режиму изолятора для объёмных состояний, когда уровень Ферми находится в запрещённой зоне. Если толщина КЯ HgTe $d < d_c$, продольное сопротивление образца соответствует тривиальному изолятору (чёрная кривая). Для более широких КЯ при $d > d_c$, когда формируется фаза ТИ, продольное сопротивление R_{xx} (красная кривая) падает на два порядка, что является признаком наличия хорошо проводящих краевых состояний в фазе ТИ [169], [209].

В правой части рис.1.32 реализуется режим проводимости *n*-типа для объёмных состояний, в связи с чем сопротивление зависит от ширины образца *W*, отмеченной как второй линейный параметр на рис.1.32 (1 мкм для тёмных кривых и 0.5 мкм для красной кривой). В левой области рисунка в режиме ТИ сопротивление значительно выше, т.к. объёмные состояния перестают давать вклад в проводимость. Вклад же обеспечивающих проводимость состояний, оказывается практически не зависимым от ширины образца *W*, что говорит об их краевой природе.



Рисунок 1.32. Зависимость продольного сопротивления R_{xx} от напряжения затвора V_g в двух режимах: в правой части рисунка реализуется режим проводимости *n*-типа для объёмных состояний, в связи с чем сопротивление зависит от ширины образца W (1 мкм для тёмных кривых и 0.5 мкм для красной кривой). В левой области рисунка в режиме ТИ сопротивление значительно выше, т.к. объёмные состояния перестают давать вклад в проводимость. Вклад обеспечивающих проводимость состояний практически не зависит от ширины образца W, что говорит об их краевой природе [169], [209].

Новые состояний, участвующих свидетельства наличия краевых В электронном транспорте в толстых (80 нм) напряжённых слоях HgTe, были получены в работе [164]. Схемы исследуемых структур показана на рис.1.33. Авторы работы [164] обнаружили, что поведение продольного сопротивления, уменьшающегося как функция поля затвора (рис.1.34) свидетельствует о наличии хорошо проводящих краевых состояний в поле затвора V_g>2 V, когда уровень Ферми перемещается из зоны проводимости в запрещённую зону объёмного материала, где существуют краевые состояния в фазе ТИ (Dirac electrons, показаны оранжевым цветом на вставке к рис.1.34(a)). С ростом магнитного поля контраст в величине продольного сопротивления становится особенно заметен (рис.1.34(b)).



Рисунок 1.33. Структуры с широкой напряжённой КЯ HgTe (синий цвет), в которых были обнаружены признаки проводящих краевых состояний в фазе ТИ [164].



Рисунок 1.34. Зависимость продольного сопротивления от поля затвора (а) для разных температур и (b) для разных магнитных полей. О наличии хорошо проводящих краевых состояний в поле затвора $V_g>2$ V, когда уровень Ферми попадает в запрещённую зону, где есть лишь краевые состояния, свидетельствует падение сопротивления. С ростом магнитного поля контраст в величине продольного сопротивления, показанный на панели (b), становится особенно заметным [164].

Для рассматриваемых в главе 4 задач о ТИ, в частности, о моделях квантовых точек в ТИ, важную роль играют эксперименты [160], [247], в которых краевые состояния взаимодействуют с магнитными барьерами или электродами. Один из таких экспериментов [160] состоял в размещении двух ферромагнитных электродов из $Fe_{20}Ni_{80}$ вдоль края структуры с КЯ HgTe/CdTe с толщиной КЯ *d*=8 нм, т.е. больше критической, когда образец находится в фазе ТИ, как это показано на рис.1.35.



Рисунок 1.35. Структура с ферромагнитными электродами F1, F2 вдоль края TИ с КЯ HgTe/CdTe. На протекание тока вдоль края влияет поляризация намагниченности электродов [160].

Важным результатом, полученным в [160], является нетривиальная зависимость измеренного дифференциального сопротивления dV/dI=f(V) от намагниченности электродов F1, F2, которая показана на рис.1.36. Именно, для включения хотя бы одного немагнитного (N) электрода вместо магнитного (красные точки) наблюдается один центральный пик при V=0, также один такой пик виден для намагниченности двух электродов, нормальной к плоскости двумерного электронного газа (2DEG) (зелёная кривая). Если же намагниченность двух

ферромагнитных электродов ориентирована в плоскости 2DEG (синяя кривая), то наблюдаются дополнительные пики dV/dI при амплитуде напряжения около 1.16 мВ. Такие пики авторы связывают со спин-зависимым транспортом вдоль краевых состояний на макроскопические (около 200 мкм) дистанции, что служит аргументом в пользу существования краевых состояний в фазе ТИ с законом дисперсии, отвечающим линейному приближению (1.49).



Рисунок 1.36. Зависимость дифференциального сопротивления dV/dI=f(V) от намагниченности электродов F1, F2 на рис.1.39. Для включения хотя бы одного немагнитного (N) электрода вместо магнитного (красные точки) наблюдается один центральный пик при V=0, также один такой пик виден для намагниченности двух электродов, нормальной к плоскости 2DEG (зелёная кривая). При намагниченности двух ферромагнитных электродов в плоскости 2DEG (синяя кривая) наблюдаются дополнительные пики dV/dI при амплитуде напряжения около 1.16 мВ [160].

1.6.4. Топологические свойства состояний в ТИ

Термин «топологический изолятор» предполагает определённые свойства топологической природы. Одним из таких свойств является связь между определёнными характеристиками объёмных состояний и наличием краевых состояний в запрещённой зоне объёмного материала. Эта связь находит своё отражение в целом числе v=0, 1, называемом Z_2 инвариантом, которое отделяет тривиальные изоляторы от топологических [130], [103], [104], [120], [209], [58]. Для тривиальных изоляторов v=0, в то время как для ТИ v=1. Для определения Z_2 инварианта воспользуемся оригинальной формулировкой Кейна и Меле [130]. Рассмотрим оператор обращения времени Θ , который может быть выражен в форме [104], [120]

$$\Theta = \exp(i\pi S_v)K, \tag{1.50}$$

где S_y есть оператор *y*-проекции спина (в единицах \hbar) и *K* есть оператор комплексного сопряжения. Для частиц со спином 1/2 оператор $S_y = \sigma_y/2$ и (1.50) принимает вид

$$\Theta = i\sigma_{\nu}K. \tag{1.51}$$

Рассмотрим далее матричные элементы оператора Θ между блоховскими функциями $|u_i(\vec{k})\rangle$ и составим их них матрицу $w_{ij} = \langle u_i(\vec{k}) | \Theta | u_j(\vec{k}) \rangle$. Даная матрица является антисимметричной. Квадратный корень из её определителя называется пфаффианом [130], [103], [104], [120], [209], [58],

$$P(\vec{k}) = \sqrt{\det \langle u_i(\vec{k}) | \Theta | u_j(\vec{k}) \rangle}.$$
(1.52)

Для антисимметричной матрицы 2х2 пфаффиан (1.52) равен её ненулевому недиагональному элементу w_{12} . Значение Z_2 инварианта v связано с поведением $|P(\vec{k})|$ в зоне Бриллюэна объёмного материала. Рассмотрим рис.1.37, взятый из основополагающей работы [130]. В определённых точках, инвариантных относительно оператора Θ , таких как Γ - или M-точка (чёрные кружки на рис.1.37), значение $|P(\vec{k})| = 1$ для любого материала. Если $|P(\vec{k})|$ не имеет нулей в других точках зоны Бриллюэна (пунктирная линия на панели (с)), либо имеет чётное число пар нулей, то v=0 и мы имеем тривиальный изолятор. Если же $|P(\vec{k})|$ имеет нули вдоль некоторого направления α_2 (сплошная линия на панели (с)) и число пар нулей нечётное, как на панели (а), то все пары нулей как для точек

 k^* , $-k^*$ на панели (а) не могут «аннигилировать», т.е. исчезнуть при слиянии в процессе плавного изменения параметров гамильтониана, поскольку при своём движении в зоне Бриллюэна они могут сделать это лишь в Γ или M точках, в которых всегда $|P(\vec{k})|=1$ и условие $|P(\vec{k})|=0$ не может быть выполнено. В этом случае v=1 и мы имеем топологический изолятор, у которого имеются краевые состояния с энергией в запрещённой зоне объёмного материала. Значение Z_2 инварианта может также быть вычислено с помощью интеграла [130], [58]

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{k}} \log P(\vec{k})$$
(1.53)

вдоль контура *C*, показанного на панели (а) рис.1.37. Интеграл (1.53) по сути представляет собой индекс особой точки для нуля пфаффиана $P(\vec{k})$.



Рисунок 1.37. (а) Θ -инвариантные точки (чёрные кружки), в которых модуль пфаффиана (1.52) равен единице, и одна пара нулей $|P(\vec{k})| k^*$, $-k^*$, что отвечает состоянию ТИ. (с) Поведение $|P(\vec{k})|$ вдоль направления α_2 в зоне Бриллюэна. Для примера с пунктирной линей нет нулей $|P(\vec{k})|$ и система является тривиальным изолятором, а для примера со сплошной линией есть точка $|P(\vec{k})| = 0$ и система может быть ТИ [130].

Мы, однако, будем вычислять Z₂ инвариант в главе 4 путём непосредственного анализа нулей пфаффиана (1.52) в зоне Бриллюэна для рассматриваемой в главе 4 системы монослоя атомов висмута на кремнии, краткий обзор литературы по которой представлен выше в пункте 1.5.

1.6.5. Некоторые свойства краевых состояний в трёхмерных ТИ

В трёхмерных ТИ, таких как Bi₂Te₃, Bi₂Se₃, Sb₂Te₃, краевые состояния располагаются на поверхности, ограничивающей образец и являются двумерными. Для них был получен гамильтониан, который содержит члены различного порядка по квазиимпульсу [105], [180], [216]:

$$H(k_x, k_y) = \hbar v_k (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar \lambda}{2} (k_+^3 + k_-^3) \sigma_z, \qquad (1.54)$$

где $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ и $k_{\pm} = k_x \pm i k_y$. Эффективная скорость $v_k = v(1 + \alpha k^2)$ в первом слагаемом может зависеть от квазиимпульса. Типичные значения параметров для Bi₂Te₃: $v=3.8...6.2\cdot10^7$ см/с, $\lambda=3.7\cdot10^{-7}$ см³/с. Основным в (1.54) является первое слагаемое, определяющее линейный по квазиимпульсу спектр дираковских состояний, а второе, квадратичное слагаемое в (1.54) является поправочным и имеет ту же осевую симметрию по k, поэтому часто не учитывается в расчётах. В этом случае для постоянной скорости v мы приходим к безмассовой и бесщелевой изотропной модели спектра, схожей с (1.49), но для двумерного волнового вектора с модулем $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$:

$$H_0(k_x, k_y) = \hbar v(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x), \quad E_{\pm}^{(0)}(k) = \pm \hbar v k.$$
(1.55)

Третье слагаемое в (1.54), кубическое по квазиимпульсу, имеет принципиально другую симметрию. Закон дисперсии в его присутствии теряет осевую симметрию и приобретает гексагональное искажение, принимая с учётом квадратичного слагаемого следующий вид:

$$E_{\pm}(k,\theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \sqrt{\hbar^2 v_k^2 k^2 + \hbar^2 \lambda^2 k^6 \cos^2(3\theta)}, \qquad (1.56)$$

где θ есть полярный угол в плоскости (k_x , k_y). Из (1.56) следует, что спектр содержит две зоны с касанием в начале координат, в каждой из которых при малых k преобладает линейный закон дисперсии, а при больших k проявляется гексагональная симметрия, как это видно на рис.1.38 из работы [180]. На рис.1.38 помимо спектра стрелками показана спиновая поляризация в k-пространстве, которая в отличие от чисто линейного по квазиимпульсу гамильтониана

Дрессельхауза или Рашбы имеет компоненту S_z , перпендикулярную плоскости (xy), в которой располагается краевое состояние, причём компонента S_z становится существенной при больших k, когда растёт влияние кубического слагаемого. При наличии магнитного поля B, перпендикулярного плоскости (xy) краевого состояния, спектр представляет собой набор уровней Ландау, которые, вообще говоря, нелинейным образом зависят от магнитного поля.

При этом в большинстве работ кубическое слагаемое в гамильтониане (1.54) не учитывалось, а его учёт по теории возмущений был произведён, например, в [216].



Рисунок 1.38. (а) Закон дисперсии (1.56) и спиновая поляризация (стрелки) вблизи Г-точки. (b) Контуры постоянной энергии для верхней ветви (1.56) и спиновая поляризация. Видна гексагональная симметрия спектра при больших *k* [180].

Квадратичное слагаемое в (1.54), как уже говорилось выше, не меняет симметрию спектра и в первом приближении может быть опущено. Для линейного по квазиимпульсу слагаемого в (1.54) гамильтониан в магнитном поле можно записать в матричном виде как [180], [38]

$$H_0 = \begin{vmatrix} \Delta & -i\varepsilon_0 a^+ \\ i\varepsilon_0 a & -\Delta \end{vmatrix},\tag{1.57}$$

где $\Delta = -g\mu_{\rm B}B/2$ есть зеемановское слагаемое с *g*-фактором *g*=18 для Bi₂Te₃ [180]. Операторы рождения *a*⁺ и уничтожения *a* определены через $k_{+} = \sqrt{2}a/\ell_{H}$, $k_{-} = \sqrt{2}a^{+}/\ell_{H}$, где $\ell_{H} = \sqrt{\hbar c/eB}$ есть магнитная длина, и удовлетворяют коммутационному соотношению [*a*,*a*⁺]=1. Энергетический параметр $\varepsilon_{0} = \sqrt{2}\hbar v/\ell_{H}$ и зеемановское слагаемое Δ определяют спектр уровней Ландау для гамильтониана (1.57):

$$E_n^{(0)} = \sqrt{\varepsilon_0^2 n^2 + \Delta^2} , \qquad (1.58)$$

где *n*=1,2,.... Волновые функции, представляющие собой двухкомпонентные спиноры, имеют вид [216], [38]

$$\Psi_n^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos\theta_n | n \rangle\\ i\sin\theta_n | n-1 \rangle \end{pmatrix}, \tag{1.59}$$

где $|n\rangle$ есть *n*-я функция гармонического осциллятора, а угол θ_n определён через равенство tg $\theta_n = (E_n^{(0)} - \Delta)/\varepsilon_0 \sqrt{n}$. При учёте квадратичного слагаемого спектр (1.58) усложняется. Совместный вид уровней Ландау поверхностных состояний вместе с уровнями Ландау объёмных состояний как функция магнитного поля показан на рис.1.39 из работы [180], где уровни объёмного материала показаны красными, а уровни поверхностных краевых состояний – синими линиями соответственно.

Нашей целью в главе 4 при исследовании состояний в ТИ семейства Bi₂Te₃ в квантующем магнитном поле будет являться изучение влияния гексагонального искажения спектра на циклотронную динамику волновых пакетов, а также магнитооптические свойства, для которых кубические слагаемые в гамильтониане приводят к ряду новых эффектов.



Рисунок 1.39. Совместный вид уровней Ландау поверхностных состояний в ТИ семейства Bi₂Te₃ вместе с уровнями Ландау объёмных состояний как функция магнитного поля с учётом первых двух слагаемых в гамильтониане (1.54). Уровни объёмного материала показаны красными, а уровни поверхностных краевых состояний – синими линиями соответственно [180].

1.6.6. ТИ с магнитными структурами и квантовые точки в ТИ

Краевые состояния в ТИ являются протяжёнными и охватывают всё поверхность (в трёхмерном ТИ) или весь одномерный край (в двумерном ТИ). Для применения таких состояний в прикладных целях, например, для передачи обработки информации, ИХ ИЛИ протяжённая структура не является благоприятным фактором, поскольку увеличивает размеры элементов схемы и увеличивает вероятность воздействия факторов рассеивания, несмотря на топологическую защиту от рассеивания на немагнитных примесях. Поэтому с первых лет активного изучения ΤИ стали предприниматься попытки экспериментального и теоретического исследования компактных объектов по типу квантовых точек (КТ), где движение носителей ограничено по всем измерениям. Разумеется, при этом некоторые топологические свойства могут быть потеряны, однако потенциальные преимущества таких структур могут превзойти их недостатки. За последние пять лет опубликовано значительное

число работ, посвящённых взаимодействию геликоидальных краевых состояний в ТИ с различными барьерами и дефектами, в том числе магнитными моментами различного происхождения и локализации. Так, были рассмотрены эффекты от ядерных спинов на транспортные свойства краевых состояний [124], воздействие магнитного иона марганца на состояния квантовой точки в ТИ на основе HgTe (Li 2019), моделирование майорановских фермионов в сверхпроводнике на основе модели о магнитных барьерах на крае ТИ [254]. Были выполнены исследования фаз с высоким значением чисел Черна в структурах с ТИ и магнитными слоями [259], а также исследования влияния точечных [224] и случайных распределений дефектов на рассеивание краевых состояний в ТИ [263], а также влияние неоднородностей профиля нанопроволоки на конфайнмент состояний в ТИ [229]. Оценки формирующейся щели в спектре краевых состояний благодаря эффекту близости магнитного диэлектрика MnSe и 3D ТИ Bi₂Se₃, выполненные методами DFT, говорят о её масштабе в 8.5 мэВ [95]. Наконец, недавно [72] методами спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) были получены свидетельства формировании запрещённой зоны до $\Delta = 120$ мэВ в спектре трёхмерном ТИ Bi₂Se₂Te, легированного редкоземельными атомами Er, как это показано на рис.1.40 из этой работы. На панели (а) показан спектр исходного ТИ, на панелях (b), (c), (d) показан спектр после легирования магнитными атомами эрбия с концентрацией 0.15, 0.30, 0.6 монослоя соответственно. После легирования в спектре формируется щель до 50..70 мэВ при максимальной концентрации эрбия на панели (d), возникающая вследствие обменного взаимодействия магнитных моментов эрбия и состояний ТИ. При этом также возникает изменение симметрии закона дисперсии, изменяясь от гексагональной до треугольной, как это видно на изоэнергетических сечениях на рис.1.40. Возникающая при этом щель с параметром $\Delta = 120$ мэВ вводится в модель как подгоночный параметр, о котором сказано, что он имеет обменную природу, поскольку одним зеемановским взаимодействием краевого состояния в магнитном поле атома Er такую большую щель объяснить нельзя. Возможно, работа [72] представляет собой одно из подтверждений обменного характера спинов магнитных атомов с состояниями в



ТИ, который может приводить к образованию локализованных состояний, рассматриваемых в главе 4 диссертации на основе модели, развиваемой в п.4.1.

Рисунок 1.40. Спектр трёхмерного ТИ Bi₂Se₂Te (a) до и (b), (c), (d) после легирования магнитными атомами эрбия с концентрацией 0.15, 0.30, 0.6 монослоя соответственно. После легирования в спектре формируется щель до 50...70 мэВ при максимальной концентрации эрбия на панели (d), возникающая вследствие обменного взаимодействия магнитных моментов эрбия и состояний ТИ [72].

Упомянутые работы, составляющие лишь незначительную долю от опубликованных, свидетельствуют о достаточно высокой актуальности тематики, связанной со взаимодействием краевых состояний в ТИ с магнитными барьерами и анализом возникающих здесь локализованных состояний. Несмотря на достаточно широкий охват задач в упомянутых работах, до сих пор, по нашему мнению, не выработаны единые взгляды на моделирование зонной структуры и потенциальное применение локализованных состояний в системах вида квантовая точка, созданных на базе ТИ с помощью магнитных барьеров, что обуславливает наш интерес к данной проблеме.

Одной из первых попыток можно считать описанную в работе [74] структуру, в которой КТ формировалась на ленте из Bi₂Se₃, показанной на рис.1.41(а), путём селективного В травления. результате получилась локализованная область, выделенная кружком между электродами на рис.1.41(b). Она имела размеры 200 нм х 200 нм х 7 нм, как показано на рис.1.41(c), где фиолетовый фрагмент "ТІ" между электродами S, D представляет собой сформированную КТ. На панели (d) показаны области без травления (синяя линия) и с травлением (красная линия), высоты поверхности вдоль которых показаны на панели (е), которые свидетельствуют о формировании поднятого рельефа в области КТ.



Рисунок 1.41. Квантовая точка в ТИ, сформированная на (а) ленте из Bi₂Se₃путём селективного травления. (b) Локализованная область КТ, выделенная кружком между электродами. (c) Схема КТ размером 200 нм х 200 нм х 7 нм (фиолетовый фрагмент "TI") между электродами S, D. (d) Области без травления (синяя линия) и с травлением (красная линия) на ленте, высоты поверхности вдоль которых показаны на (e), которые свидетельствуют о формировании поднятого рельефа в области КТ [74].

Транспортные свойства такой структуры показаны на рис.1.42 из этой же работы [74], на котором показана карта дифференциальной проводимости dl/dV как функция напряжения V между истоком S стоком D, а также поля затвора V_g . Тёмные ромбовидные участки малой проводимости на рис.1.41 говорят о наличии областей с кулоновской блокадой транспорта, что является свидетельством формирования локализованных состояний в КТ. Стрелки указывают на особенности dl/dV, которые связываются с проявлением возбуждённых состояний в КТ. Анализируя результаты работы [74], сложно сделать однозначный вывод о роли краевых состояний в формируемой КТ, т.е. о проявлении специфических свойств ТИ.



Рисунок 1.42. Дифференциальная проводимость dI/dV для структуры на рис.1.41 как функция напряжения V между истоком S стоком D, а также поля затвора V_g . Тёмные ромбовидные участки малой проводимости говорят о наличии областей с кулоновской блокадой транспорта, что является свидетельством формирования локализованных состояний в КТ. Стрелки указывают на особенности dI/dV, которые связываются с проявлением возбуждённых состояний в КТ [74].

Теоретические исследования спектра в ограниченной структуре вида КТ с гамильтонианом ТИ начались приблизительно в начале 2010-х годов. Среди первых можно упомянуть работу [166], в которой на примере гамильтониана поверхностных состояний в трёхмерном ТИ типа Bi_2Se_3 были рассчитаны уровни энергии и волновые функции в геометрии цилиндра радиуса *R* и высоты *L*. Если взять за основу гамильтониан (1.54) без кубического слагаемого и принять на поверхности цилиндра *S* граничное условие с непроницаемой стенкой,

$$\psi(r, \varphi, z)|_{S} = 0,$$
 (1.60)

то можно получить дискретный спектр, который как функция полуцелого углового момента *j* показан на рис.1.43 для радиуса КТ *R*=20 нм и длины цилиндра *L*=44 нм. Синие треугольники отвечают численному расчёту, а красные кружки – аналитическому приближению

$$E_{j,n,\pm} = \pm \sqrt{\left(\pi n v_1 / L\right)^2 + \left(j v_2 / R\right)^2} , \qquad (1.61)$$

(1.54)где параметры определяются параметрами гамильтониана v_{12} поверхностных состояний в Bi₂Se₃. Основным вопросом, возникающим к сделанным приближениям, является использование граничных условий (1.60) для требует полной непроницаемой стенки, ЧТО ПО сути изолированности цилиндрической КТ от окружающего пространства, либо очень высоких барьеров, которые в чисто электростатическом случае слабо эффективны для краевых состояний в ТИ с линейным законом дисперсии [133].



Рисунок 1.43. Дискретный спектр в КТ цилиндрической геометрии для радиуса КТ R=20 нм и длины цилиндра L=44 нм с поверхностными состояниями в Bi₂Se₃ как функция углового момента *j*. Синие треугольники отвечают численному расчёту, красные кружки – аналитическому приближению (1.60) [166].

Вопрос о физических механизмах ограничения движения в КТ, волновые функции в которых формируются из дираковских безмассовых состояний со

спектром вида (1.49) или (1.55), приводит к одному из возможных решений, заключающихся в использовании барьеров с намагниченностью, если на систему не наложено внешнее магнитное поле. Одной из первых работ в этом направлении можно назвать статью [253], в которой рассматривалась модель одномерных краевых состояний в двумерном ТИ на базе HgTe/CdTe, эффективный гамильтониан которых имеет вид (1.48). В работе [253] магнитные барьеры моделировались как бесконечно тонкие и бесконечно высокие с помощью двух δ -функций, расположенных на расстоянии *L* друг от друга вдоль края ТИ, вдоль которого направлена ось *Ox*. Это приводило к гамильтониану вида

$$H_0 = Ak_x \sigma_z - \eta A \sigma_x \delta(x) - \alpha \eta A \sigma_x \delta(x - L) + V(x), \qquad (1.62)$$

где η есть безразмерная высота барьера и $\alpha = \pm 1$, а V(x) есть дополнительный скалярный потенциал вдоль области [0... *L*], в которой формируются дискретные уровни КТ. Принципиальная схема структуры из работы [253] показана на рис.1.44, где синий фрагмент показывает область КТ, находящуюся между двумя параллельно или антипараллельно намагниченными барьерами (зелёные фрагменты).



Рисунок 1.44. Схема структуры с квантовой точкой (синий фрагмент) между двумя параллельно или антипараллельно намагниченными барьерами (зелёные фрагменты) на крае ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe с гамильтонианом краевых состояний в присутствии магнитных барьеров в форме (1.62) [253].

В модели (1.62) барьеры при $\alpha=1$ могут быть ориентированы либо параллельно вдоль оси Ox, что также показано бордовыми стрелками на зелёных областях магнитов рис.1.44, либо антипараллельно при $\alpha=-1$. Для обеспечения непроницаемости барьеров, что необходимо для формирования дискретного спектра, в работе [253] выполнялся предельный переход $\eta \rightarrow \infty$. При этом для $V(x)\equiv 0$ дискретный спектр имел вид

$$E_{n} = \frac{\pi A}{L} \cdot \begin{cases} (n+1/2), & \alpha = 1\\ n, & \alpha = -1 \end{cases},$$
 (1.63)

где $n = 0, \pm 1, \pm 2$ и первый случай с $\alpha = 1$ отвечает барьерам с параллельной намагниченностью в гамильтониане (1.62), а второй случай α=-1 отвечает антипараллельной ориентации барьеров. В отличие от привычных состояний ненулевой массой, спектр (1.63) лаёт частиц с две эквидистантных последовательности уровней, уходящих вверх и вниз от энергии E=0, называемой точкой Дирака. Для антипараллельной ориентации барьеров уровень для *n*=0 совпадает с этой точкой. Волновые функции гамильтониана (1.62) с V(x)=0 являются двухкомпонентными спинорами и в области [0... L] могут быть найдены явно с учётом граничных условий $(1 + \sigma_v)\psi_n(0) = 0$, $(1 \mp \sigma_v)\psi_n(L) = 0$. Эти условия следуют из интегрирования гамильтониана (1.62) в окрестности граничных точек x=0, *L*. В результате для волновых функций получается выражение

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{pmatrix} \exp(iE_n x/A) \\ -i\exp(-iE_n x/A) \end{pmatrix}.$$
 (1.64)

Модель (1.62) была обобщена в [87] для случая произвольной ориентации магнитного барьера на правом крае КТ при x=L, если его намагниченность ориентирована под углом θ к оси Ox в плоскости (xy). В этом случае гамильтониан принимает вид

$$H_{I} = Ak_{x}\sigma_{z} - \eta A[\delta(x) \sigma_{x} + \delta(x - L)(\sigma_{x} \cos \theta - \sigma_{y} \sin \theta)], \qquad (1.65)$$

где вновь для обеспечения существования непроницаемых барьеров необходимо делать предельный переход $\eta \rightarrow \infty$. Принципиальные свойства спектра и волновых

функций для гамильтониана (1.65) остаются теми же, что и для его частного случая (1.62) при $\theta=0$ или $\theta=\pi$. Сходной является ситуация и с пространственно неоднородным массовым членом для краевых состояний, использованным в работе [96], в которой гамильтониан имел вид

$$H_2 = Ak_x \sigma_z + m(x)\sigma_z + V(x), \qquad (1.66)$$

где массовый член $m(x)\sigma_{z}$, эквивалентный магнитному полю, имел кусочнонепрерывную структуру в областях КТ и окружающих её барьеров. Очевидно, что для построения микроскопически обоснованной модели КТ с магнитными барьерами требуется рассматривать некоторый микроскопический механизм взаимодействия краевых состояний в ТИ с магнитными моментами частиц, из состоит барьер. Мы рассмотрим которых некоторые ИЗ полученных предшественниками результаты в этом направлении ниже в данном пункте, а более подробно разработанная нами модель будет описана в главе 4 настоящей диссертации.

Были выполнены работы и с учётом магнитных барьеров при формировании КТ на крае трёхмерных ТИ из поверхностных состояний, среди которых одной из первых была работа [99]. В ней рассматривался гамильтониан поверхностных состояний с линейным вкладом из (1.54), дополнительным электростатическим потенциалом V(x,y) и локальным магнитным полем *B*, перпендикулярным плоскости края ТИ, который имел вид

$$H = \hbar v_k (k_x \sigma_y - k_y \sigma_x) + V(x, y) + \gamma B \sigma_z.$$
(1.67)

Принципиальная схема структуры из работы [99] показана на рис.1.45(а), (с) с видами сбоку и сверху-сбоку. Рассматривались как случаи протяжённого канала, стенки которого сформированы линейными блоками с различной намагниченностью (фиолетовые слои со стрелками), так и компактных круглых фрагментов с магнитным диском. Исходный спектр краевых состояний, определяемый первым слагаемым в гамильтониане (1.67), показан на панели (b). Включение локального магнитного поля, т.е. последнего слагаемого в (1.67), приводит к появлению щели в спектре шириной $2\gamma_z B_z$, который имеет вид

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{A^2 k^2 + \gamma_z^2 B^2} \,. \tag{1.68}$$

Схема спектра (1.68) и спиновой поляризации показана на панели (c), а идея с объединением серий КТ во взаимодействующие кубиты показана на панели (d). Для получения локализованных состояний в работе [99] накладывались граничные условия на границе одномерного канала или круглой КТ на панелях (a), (c) рис.1.45, вытекающие из вида скалярного потенциала конфайнмента V(x,y) в (1.75) в полярной системе координат:

$$V(\rho) = V_0 \widetilde{M} \Theta(\rho - \rho_B), \qquad (1.69)$$

где ρ_B есть радиус границы КТ, Θ есть ступенчатая функция, а \tilde{M} есть унитарная и эрмитова матрица, для большинства случаев сводящаяся к матрицам Паули. Дискретный спектр вместе со спиновой поляризацией состояний показан на рис.1.46 (а) – (с) при различных значениях потенциала V_i на границе как функция квантового числа – углового момента L_z . Плотность вероятности $|\psi(\rho)|^2$ для двух нижни[состояний с положительной энергией показана на панелях (d)-(e).



Рисунок 1.45. (а), (с) Схема структуры с одномерным каналом и с квантовой точкой (границы показаны голубым цветом), сформированные локальным магнитным полем (фиолетовые области ферромагнетика). (с) Спектр (1.68) без магнитного поля (зелёные линии) и с учётом магнитного поля (оранжевые линии). (d) схема по объединению нескольких КТ в пару кубитов [99].

Следует отметить, что в работе [99] наличие последнего члена $\gamma B \sigma_z$ в гамильтониане (1.67), т.е. магнитного поля от локального барьера, вовсе не является обязательным для формирования дискретного спектра, который обязан своему появлению наличию граничных условий вида (1.69).В ЭТОМ прослеживается сходство работы [99] с более ранней работой [166], описанной выше в этом же пункте. Физический же механизм появления подобных граничных условий, заставляющий волновую функцию спадать вглубь барьера, в цитированных работах в значительной мере оставался нераскрытым. Это побудило нас искать пути построения такой модели локализованных квантовых состояний на одномерном крае двумерного ТИ, которая учитывала бы микроскопический механизм взаимодействия краевого состояния с магнитным моментом материала, составляющего барьер.



Рисунок 1.46. (а)-(с) Дискретный спектр вместе со спиновой поляризацией состояний для системы на рис.1.45 при различных значениях потенциала V_i на границе как функция квантового числа – углового момента L_z . (d)-(e) Плотность вероятности $|\psi(\rho)|^2$ для двух нижний состояний с положительной энергией. [99].

Отправной точкой на этом пути логично выбрать модель взаимодействия краевого состояния с одиночной магнитной примесью, которая была развита, например, в работах [167], [168]; см. также [179], [183], [94], [186], [156], [100], [264]; о взаимодействии краевых состояний с ядерными спинами см. [124], [124]. В этой модели рассматривается оператор взаимодействия краевого состояния в модели ВНZ с одиночной магнитной примесью, локализованной в точке (x_0, y_0, z_0) и имеющей спин $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$:

$$V_{imp} = V(z_0) \cdot f(x - x_0, y - y_0, z - z_0), \qquad (1.70)$$

где функция $f(x-x_0, y-y_0, z-z_0)$ описывает пространственный профиль потенциала примеси, а спиновый оператор в базисе состояний в модели ВНZ (1.40) описывается матрицей [167], [168]

$$V(z_0) = \begin{vmatrix} J_1 S_z & -iJ_0 S_+ & J_m S_- & 0\\ iJ_0 S_- & J_2 S_z & 0 & 0\\ J_m S_+ & 0 & -J_1 S_z & -iJ_0 S_-\\ 0 & 0 & iJ_0 S_+ & -J_2 S_z \end{vmatrix} .$$
 (1.71)

В (1.71) $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$, а параметры J_0 , J_1 , J_2 , J_m , являющиеся вещественными функциями координаты z_0 , определяются профилями компонент огибающей функции в модели ВНZ [57]:

$$\begin{cases} J_{0} = \frac{i\beta}{\sqrt{3}} f_{3}(z_{0}) \overline{f_{4}(z_{0})}, \\ J_{1} = \alpha |f_{1}(z_{0})|^{2} + \frac{\beta}{3} |f_{4}(z_{0})|^{2}, \\ J_{2} = \beta |f_{3}(z_{0})|^{2}, \\ J_{m} = J_{1} + J_{0}^{2} / J_{2}. \end{cases}$$
(1.72)

В (1.72) функции $f_{1,3}(z_0)$ являются симметричными при замене $z_0 \rightarrow -z_0$, а функции $f_{2,4}(z_0)$ являются антисимметричными. Параметры α , β пропорциональны величине обменного взаимодействия между краевым состоянием и магнитной примесью, которая может достигать нескольких десятков мэВ [179], [94], [264]. Вычисляя матричные элементы оператора (1.71) в базисе краевых состояний (1.42), мы

получаем эффективный гамильтониан взаимодействия краевого состояния с магнитной примесью в виде [167], [168], [153]

$$V(z_0) = ((J_1 + J_2)S_z - 2J_0S_x)\sigma_z + J_m(S_x\sigma_x + S_y\sigma_y)$$
(1.73)

Если от одиночных магнитных примесей мы перейдём к макроскопическому магниту, то потребуется усреднение оператора (1.73) по всему объёму магнитного барьера, реализацию которого можно искать в классе диэлектрических магнитов семейства MnSe или EuSe [183], [186]. Развитие этой модели будет рассмотрено в главе 4 настоящей диссертации.

1.6.7. Прохождение дираковских состояний через потенциальные барьеры

Одним из наиболее удивительных эффектов для дираковских (безмассовых) состояний с гамильтонианом вида (1.55) с линейным законом дисперсии, когда двум ветвям спектра отвечают противоположные проекции спина (как говорят, разные киральности), является эффект полного прохождения через электростатический потенциальный барьер при нормальном падении на него плоской волны. Этот эффект, названный клейновским туннелированием по аналогии с явлением из квантовой электродинамики, рассматривался прежде всего в структурах на основе графена, где гамильтониан в низкоэнергетической области может быть аппроксимирован выражением (1.55). Явление клейновского обычно упоминается при решении туннелирования задачи 0 влиянии потенциального барьера на транспорт дираковских (безмассовых) состояний, которая рассматривалась во многих работах [221], [133], [191], [50], [267], причём не только с электростатическими, но и с магнитными барьерами [265], [159], [271], [266], [96]. [181], [268], [231]. Происхождение клейновского туннелирования иллюстрирует рис.1.47(а) из работы [133]. Пусть слева на барьер высоты V_0 , показанный на рис.1.47(b), падает плоская волна, т.е. электрон с дираковским спектром, сечение которого показано как сечение конуса слева вместе с положением уровня Ферми в верхней зоне. Внутри барьера энергия в спектре увеличиваются на V₀, и электрон с тем же значением энергии Ферми

оказывается в нижней, дырочной зоне, с тем же псевдоспином σ , поскольку групповая скорость $\partial E/\partial k$ сохраняет свой знак на данной (красной) ветви спектра. Электрон не может отразиться назад, поскольку ему пришлось бы перейти на другую, зелёную ветвь спектра, где скорость и направление псведоспина противоположное. Для чисто электростатического барьера такой переворот спина невозможен. Поэтому электрон покидает барьер в том же направлении и выходит справа с той же скоростью и тем же псевдоспином, как это показано на третьем, правом сечении конуса на рис.1.46(а).



Рисунок 1.47. (а) Клейновское туннелирование электрона с дираковским спектром (1.55) через электростатический потенциальный барьер, показанный на панели (b) [133].

Если падение плоской волны на барьер в двумерной задаче не является нормальным, полное прохождение, вообще говоря, уже не имеет места. Типичная зависимость коэффициента прохождения T от энергии падающей волны $\varepsilon = E/V_0$, измеряемой в единицах высоты барьера V_0 , а также от угла падения φ , показана на рис.1.48, взятом из работы [50], для значения безразмерной ширины барьера $l=V_0d/(2\pi A)=1$, где d есть линейная ширина барьера и $A=\hbar v$ есть константа в спектре (1.55). Можно видеть, что полное прохождение с $T \rightarrow 1$ наблюдается для нормального падения вдоль линии $\varphi=0$ для всех энергий, а при ненулевых углах

отклонения от нормали к барьеру коэффициент прохождения уменьшается достаточно резко, испытывая осцилляции вида резонансов Фабри-Перо. Как следствие, возникает вопрос о динамике не только плоских волн с дираковским спектром, но и собранных из них волновых пакетов.



Рисунок 1.48. Зависимость коэффициента прохождения $T(\varepsilon, \varphi)$ при падении плоской волны на барьер высоты V_0 от её энергии $\varepsilon = E/V_0$ и от угла падения φ , отсчитываемого от нормали к барьеру. Полное прохождение для всех энергий имеет место только при нормальном падении при $\varphi=0$ [50].

Свободная динамика релятивистских таких волновых пакетов исследовалась в ряде работ [84], [85]. Известно, что в ней проявляются особенности наличия нескольких ветвей спектра, в том числе коллапс и возрождение пространственной структуры пакета. Представляет интерес рассмотреть динамику таких пакетов и для двумерных состояний на поверхности ТИ со спектром вида (1.55) в присутствии как электростатических барьеров, так и барьеров с намагниченностью. Подобный пакет, локализованный в области

размерами (Δx , Δy) с центром в точке (x_0 , y_0) и средним волновым вектором (\bar{k}_x, \bar{k}_y), можно представить как произведение двухкомпонентного спинора на огибающую функцию:

$$\Psi(x,y) = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \cdot \exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2\Delta x^2} + i\bar{k}_x x\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{(y-y_0)^2}{2\Delta y^2} + i\bar{k}_y y\right\}.$$
 (1.74)

В такой волновой пакет входят состояния с различной ориентацией волнового вектора $\vec{k} = (k_x, k_y)$, поскольку Фурье-образ от (1.74) содержит ненулевые вклады, заполняющие двумерное *k*-пространство. Глядя на рис.1.47, можно сделать предположение, что для двумерного волнового пакета (1.74) полного прохождения можно не ожидать даже для случая чисто электростатического барьера. Ещё менее тривиальным представляется случай магнитного барьера. Такая задача с исследованием прохождения волнового пакета (1.74) через электростатический барьер и барьер с намагниченностью рассматривается в заключительном разделе главы 4 настоящей диссертации. Используются различные методы, в том числе расчёт нестационарной эволюции волнового пакета при его взаимодействии с барьером, выполняемый в рамках численного метода Кэли [25].

КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ СО СОВ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В данной главе диссертации рассматриваются задачи об эволюции наблюдаемых величин, прежде всего для координат и спиновых проекций, для электронов и дырок в различных структурах с полупроводниковыми квантовыми точками. Основное внимание уделяется двойным квантовым точкам с сильным СОВ в нестационарном электрическом поле, которые уже более двух десятков лет рассматриваются как кандидаты в структуры для квантовых вычислений [70]. Для таких систем процессы туннелирования между точками неразрывно сопряжены с эволюцией спина, что даёт возможности управления спиновой динамикой при взаимодействии с координатной степенью свободы при туннелировании. Система при этом выходит за рамки двухуровневого приближения, поскольку в динамике участвует минимум по паре спин-расщеплённых уровней в каждой из двух квантовых точек. Основным эффектом для управления спином с помощью периодического электрического поля является электрический дипольный спиновый резонанс (ЭДСР), теория и эксперименты по которому кратко описаны в п.1.2 первой главы диссертации. Нашей задачей в данной главе 2 является установление взаимосвязи между процессами координатной эволюции, прежде всего туннелирования, и спиновой динамики, прежде всего ЭДСР, в различных наноструктурах с квантовыми точками (КТ) с СОВ и под действием электрических полей с различным профилем во времени.

Структура главы 2 диссертации следующая. В п.2.1 динамика в периодическом электрическом поле в двойной КТ с непроницаемым барьером исследуется в рамках квазиклассического приближения. В п.2.2 и далее используется полностью квантовая модель с расчётом спектра и спинорных волновых функций. В п.2.1 рассматривается динамика туннелирования и спина в импульсном электрическом поле в двойной КТ. В п.2.3 рассматривается динамика в периодическом поле, особое внимание обращается на зависимость частоты переворота спина от амплитуды поля в многоуровневой системе. В п.2.4. рассматривается эволюция в большой КТ со СОВ, так называемом квантовом биллиарде, где в динамике принимает участие большое число уровней. Рассматриваются режимы перехода к нерегулярной динамике, где обнаружено разрушающее влияние нерегулярности на связь спиновой и пространственное степени свободы, проявляющееся в ослаблении корреляций зарядовой и спиновой плотности. В п.2.5 рассматривается динамика в двойной КТ под действием импульсов электрического поля специально подобранного вида, чтобы достичь финального состояния за максимально короткое время. В п.2.6 рассматривается эволюция в одиночной КТ в нанопроволоке, где помимо одного или нескольких дискретных уровней учитываются переходы в состояния континуума, на которые оказывает влияние СОВ. В п.2.7 рассматривается динамика в двойной КТ в пространстве параметров системы, где обнаружены различные режимы эволюции, в том числе комбинированный, «гибридный» резонанс с одновременным эффективным туннелированием и переворотом спина. Также рассматривается динамика на субгармониках ЭДСР, где обнаружена высокая эффективность управляемых периодическим полем вращений спина.

2.1. Квазиклассическая динамика координаты и спина в двойной квантовой точке со слабо проницаемым барьером

Мы будем рассматривать в основном одномерную модель двойных квантовых точек (КТ), сформированных полем затвора в двумерном электронном или дырочном газе, схемы и эксперименты с которыми были рассмотрены в разделе 1.2.3. диссертации. Схема наиболее часто используемой нами одномерной модели двойной КТ показана на рис.2.1. Минимумы потенциала расположены в точках -d и d, высота центрального барьера есть U_0 . Мы будем использовать аппроксимацию потенциала двойной КТ в форме полинома четвёртой степени:

$$U(x) = U_0 \left[-2\left(\frac{x}{d}\right)^2 + \left(\frac{x}{d}\right)^4 \right].$$
(2.1)

Для симметричного потенциала (2.1) с двумя минимумами нижняя пара уровней образуется при расщеплении основного состояния в одиночной яме на величину 2 γ , определяемую туннельной прозрачностью барьера *D*, которую квазиклассически можно оценить как [27]

$$2\gamma = \frac{\hbar\omega_0}{\pi}\sqrt{D}, \quad D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p| dx\right), \quad (2.2)$$

где ω_0 есть частота малых колебаний в одиночной яме (левой или правой) на рис.2.1, *а* и *b* есть квазиклассические точки поворота в одной из ям. При учёте спина 1/2 в присутствии постоянного магнитного поля B_z , вдоль которого направлена ось *Oz*, перпендикулярная плоскости двумерного газа, появляется зеемановское расщепление Δ_Z .



Рисунок 2.1. Модель двойной квантовой точки в одномерном приближении с потенциалом (2.1), где минимумы одиночных КТ расположены при x=-d и x=d, а U_0 есть высота барьера между КТ. В присутствии зеемановского расщепления Δ_Z уровни с одинаковой орбитальной чётностью располагаются парами при условии $\Delta_Z < \Delta E_g$, где ΔE_g есть обусловленное туннельным расщеплением расстояние между орбитальными уровнями с различной чётностью с квазиклассической оценкой (2.2) [142].

Каждый из орбитальных уровней расщепляется на два, поэтому уровни с одинаковой орбитальной чётностью и противоположной проекцией спина на направление спином располагаются парами при условии $\Delta_Z < \Delta E_g$, где ΔE_g есть обусловленное туннельным расщеплением расстояние между орбитальными уровнями с различной чётностью с квазиклассической оценкой (2.2). На рис.2.1 этому соответствуют пары соседних уровней, обозначенные линиями одинакового цвета.

2.1.1. Модель и уравнения квазиклассической динамики

Мы начнём рассмотрение задач о динамике заряда и спина в переменном поле со случая электронов в GaAs, находящихся в потенциале (2.1) двойной КТ, где барьер высоты U_0 и эффективной ширины 2*d* является высоким и широким, т.е. слабо проницаемым [140]. В этом параграфе мы примем систему единиц с $\hbar = 1$. Гамильтониан в приближении эффективной массы мы запишем как

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) - F(t)x + \beta \sigma_x p_x + \frac{1}{2}g\mu_B \sigma_z B_z, \qquad (2.3)$$

где третье слагаемое с $F(t)=e\mathcal{E}(t)$ есть скалярный потенциал электрического поля с напряжённостью $\mathcal{E}(t)$, четвёртое слагаемое описывает СОВ Дрессельхауза, последнее слагаемое есть зеемановский член. Параметры КТ в потенциале (2.1) следующие: расстояние от центра до минимума потенциала $d = 100\sqrt{2}$ нм, высота барьера $U_0=25$ мэВ. Эффективная масса для электронов GaAs m=0.067 m_0 , значение g-фактора g=-0.45, значение параметра Дрессельхауза $\beta=2$ мэВ·нм. Частота колебаний в одиночной яме

$$\omega_0 = \frac{2\sqrt{2U_0/m}}{d} \tag{2.4}$$

с такими параметрами равна $4.96 \cdot 10^{12}$ с⁻¹, квазиклассическая оценка числа уровней в яме $N = 4d\sqrt{2mU_0}/3\pi$ даёт *N*~8. Барьер с указанной высотой и шириной является очень слабо проницаемым, поскольку оценка (2.2) даёт величину $D\sim 10^{-35}$. Это даёт основания нам пренебречь туннельными эффектами и рассматривать квазиклассически динамику величины *X*(*t*), представляющей собой среднее значение координаты, импульса или спиновой проекции. Воспользуемся уравнением движения

$$\frac{dX}{dt} = i[H, X], \qquad (2.5)$$

что с гамильтонианом (2.3) даёт следующие уравнения движения для средних значений координаты x(t), импульса $p_x(t)$ и проекций вектора спина $\vec{\sigma} = (\sigma_x(t), \sigma_y(t), \sigma_z(t))$ [140]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{m} + \beta \sigma_x \\ \frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x} + F(t) - \frac{p_x}{\tau_p} \\ \frac{d\vec{\sigma}}{dt} = \left[(\omega_{SO}\vec{r} + \operatorname{sign}(g)\omega_L\vec{e}_z), \vec{\sigma} \right], \end{cases}$$
(2.6)

где $\omega_L = |g| \mu_B B_z$ есть ларморовская частота, $\omega_{SO} = 2\beta p_x$, и во втором уравнении (2.6) введено феноменологически время релаксации импульса $\tau_p = 5$ пс. Поскольку для наших параметров выполнено условие $\omega_0 \tau_p >> 1$, где ω_0 есть частота колебаний в одиночной яме, то наличие релаксации импульса не влияет заметно на динамику на характерных временах до нескольких десятков периодов $T_0 = 2\pi/\omega_0$. Что касается времени релаксации спина τ_s , то для электронов в КТ в GaAs оно на несколько порядков больше времени релаксации импульса [134], [92], [111] и поэтому не будет учитываться в модели (2.6). Типичное начальное условие для системы (2.6) будет описывать электрон со спином вверх, локализованный в минимуме $x = \pm d$ одной из КТ.

2.1.2. Результаты для эволюции координаты и спина

ſ

Рассмотрим примеры динамики для системы (2.6). Мы начнём со случая зеемановского резонанса, когда на систему подаётся периодическое поле $\mathcal{E}(t) = -\mathcal{E}_0 \sin(\omega t)$ на ларморовской частоте.

$$\omega = \omega_{\rm L}. \tag{2.7}$$

Пример орбитальной эволюции в системе (2.6) в виде фазового портрета на плоскости (x, p_x) показан на рис.2.2 для интервала времени от 0 до 700 пс, что отвечает многим периодам колебаний в одиночной яме с частотой ω_0 из (2.4). Магнитное поле B_z =4 T, что отвечает ларморовской частоте ω_L =1.6·10¹¹ c⁻¹, амплитуда электрического поля \mathcal{E}_0 =2.60 кВ/см. При такой амплитуде наблюдается переброс электрона в соседнюю КТ, как это видно на рис.2.2, где значительное число периодов колебаний в одной из КТ сопровождается перебросом в соседнюю КТ. Примеры эволюции спиновой проекции $s_z(t)$ в системе (2.6)

показаны на рис.2.3(а) того же магнитного поля B_z =4 Т. Чёрная сплошная линия отвечает амплитуде электрического поля \mathcal{E}_0 =2.55 кВ/см, когда не происходит переброс электрона в соседнюю КТ.



Рисунок 2.2. Фазовый портрет на плоскости (x, p_x) для эволюции при зеемановском резонансе (2.7) для интервала времени от 0 до 700 пс, что отвечает многим периодам колебаний в одиночной яме с частотой ω_0 из (2.4). Магнитное поле $B_z=4$ Т, амплитуда электрического поля $\mathcal{E}_0=2.60$ кВ/см. Наблюдается переброс электрона между соседними КТ, когда значительное число периодов колебаний в одной из КТ сопровождается перебросом в соседнюю КТ [140].

Красная кривая с индексом *n* отвечает полю \mathcal{E}_0 =2.60 кВ/см, когда наблюдается переброс в соседнюю КТ (см. рис.2.2). Синяя кривая с индексом *w* показывает результат для более широкой двойной КТ, когда переброс в соседнюю КТ имеет место при более слабом поле \mathcal{E}_0 =1.50 кВ/см. Можно видеть, что наличие орбитального движения с большой амплитудой между двумя КТ приводит к более быстрому перевороту спина по сравнению с эволюцией в одиночной КТ. Чёрная пунктирная линия на рис.2.3(а) отвечает динамике при \mathcal{E}_0 =2.55 кВ/см с отстройкой от резонанса при ω =1.1 ω_L . Видно, что выполнение резонансного условия (2.7) существенно для достижения переворота спина.



Рисунок 2.3. (а) Эволюции спиновой проекции $s_z(t)$ в системе (2.6) для тех же условий, что на рис.2.2. Чёрная сплошная линия отвечает амплитуде поля $\mathcal{E}_0=2.55$ кВ/см, когда не происходит переброс электрона в соседнюю КТ. Красная кривая с индексом *n* отвечает полю $\mathcal{E}_0=2.60$ кВ/см, когда наблюдается переброс в соседнюю КТ (см. рис.2.2). Синяя кривая с индексом *w* показывает результат для более широкой двойной КТ, когда переброс в соседнюю КТ имеет место при более слабом поле $\mathcal{E}_0=1.50$ кВ/см. Чёрная пунктирная линия отвечает динамике при $\mathcal{E}_0=2.55$ кВ/см с отстройкой от резонанса при $\omega=1.1 \omega_L$. (b) Амплитуды Фурье-спектра $|s_z(\omega)|^2$ для примеров (*n*) и (*w*) на панели (a). Наблюдаются пики вблизи частоты Раби (2.8). (c),(d) «Фазовые портреты» для эволюции спиновых проекций в паре ($s_y(t)$, $s_z(t)$) для примеров (*n*) и (*w*) на панелях (a), (b) [140].

Помимо развёртки динамики во времени представляют интерес амплитуды Фурье-спектра $|X(\omega)|^2$ для эволюции X(t), которые показаны на рис.2.3(b) для спектра $|s_z(\omega)|^2$ для двух примеров динамики в узкой (*n*) и широкой (*w*) двойной КТ, которые показаны на панели (a) рис.2.3. Наблюдаются пики вблизи частоты Раби эволюции спиновой проекции $s_z(t)$, определённой в резонансном приближении как

105

$$\Omega_{\mathrm{R}} = \beta p_{\mathrm{R}}, \quad p_{\mathrm{R}} = |eE_0|\omega_{\mathrm{L}}/\omega_0^2. \tag{2.8}$$

Согласно (2.4) и (2.8) частота Раби растёт с ростом ширины КТ d, поэтому пик на кривой (w) сдвинут вправо относительно пика на кривой (n). Помимо этих пиков на рис.2.3(b) виден значительный вклад в широком интервале частот вокруг них, что свидетельствует о переходе к нерегулярной динамике. На рис.2.3(c),(d) показаны «фазовые портреты» для эволюции спиновых проекций в паре $(s_v(t),$ $s_z(t)$) для примеров (n) и (w) на панелях (a), (b) и на том же интервале времени эволюции, что на рис.2.2. Можно видеть, что при динамике в пределах одной КТ на панели (с) при $\mathcal{E}_0=2.55$ кВ/см эволюция спина носит регулярный характер, в то время как при переходе в режим с перебросом в соседнюю КТ на панели (d) при $\mathcal{E}_0 = 2.60 \text{ кB/см}$ спиновая динамика существенно усложняется, как это также видно на Фурье-спектрах на панели (b). Можно сделать вывод, что орбитальное движение с большей амплитудой при перебросе в соседнюю КТ ускоряет переворот спина, как это видно на панели (а) при сравнении синей и красной кривой с чёрной кривой. При этом, однако, приходится расплачиваться зачастую существенно более сложной спиновой динамикой, как это видно из сравнения панелей (с), (d) на рис.2.3.

Представляет интерес проследить за динамикой средних значений координаты и спина для другого типа резонанса, называемого орбитальным, когда частота электрического поля равна частоте колебаний в одиночной КТ,

$$\omega = \omega_0. \tag{2.9}$$

Эволюция координаты x(t) и спиновой проекции $s_2(t)$ для этого случая показана в поле $\mathcal{E}_0=1.60$ кВ/см на рис.2.4(а) и (b) соответственно для базового значения gфактора g=-0.45 (сплошная чёрная линия) и для сравнения в случае большого gфактора g=4.0 (красная пунктирная линия). Амплитуда колебаний x(t) говорит о том, что электрон попадает в обе КТ. Что касается спина, то на панели (b) можно видеть, что увеличение g-фактора приводит к более глубокой модуляции спиновой проекции. Фурье-спектры для x(t) (красная пунктирная линия) и $s_z(t)$ (синяя сплошная линия) при g=-0.45 показаны на рис.2.4(с). Можно сделать вывод, что основная часть спектральных компонент для координаты и спина заключена между частотами ω_L и ω₀, причём спектральная картина для спина выглядит менее регулярной, чем для координаты.



Рисунок 2.4. (а) Эволюция координаты x(t) и (b) спиновой проекции $s_z(t)$ для орбитального резонанса (2.8) в поле $\mathcal{E}_0=1.60$ кВ/см для g-фактора g=-0.45 (сплошная чёрная линия) и для сравнения g=4.0 (красная пунктирная линия). (c) Фурье-спектры для x(t) (красная пунктирная линия) и $s_z(t)$ (синяя сплошная линия) при g=-0.45. (d), (e) Фазовые портреты в паре ($s_y(t)$, $s_z(t)$) для (d) $d = 100\sqrt{2}$ нм и $\mathcal{E}_0=1.6$ кВ/см и (e) для $d = 200\sqrt{2}$ нм и $\mathcal{E}_0=2.0$ кВ/см. В более слабом поле и в более узкой КТ переворот спина на панели (d) не наблюдается, в то время как в чуть более сильном поле и в более широкой КТ происходит полный переворот спина [140].

На панелях (d), (e) показаны фазовые портреты в паре $(s_y(t), s_z(t))$ для (d) размера КТ $d = 100\sqrt{2}$ нм и амплитуды поля $\mathcal{E}_0=1.6$ кВ/см и (e) для $d = 200\sqrt{2}$ нм и амплитуды поля $\mathcal{E}_0=2.0$ кВ/см. Видно, что в более слабом поле и в более узкой КТ переворот спина на панели (d) не наблюдается, в то время как в чуть более сильном поле и в более широкой КТ на панели (e) происходит полный переворот спина. Эти результаты свидетельствуют о значительном влиянии геометрических, орбитальных характеристик динамики электронов или дырок в КТ со СОВ на их спиновую динамику. Параметры системы или внешнего электрического поля оказывают непосредственное влияние на режимы спиновой эволюции, что важно для приложений в спинтронике и наноэлектронике.

2.2. Эволюция вероятности туннелирования и спина в двойной квантовой точке в импульсном электрическом поле

2.2.1. Квантовые состояния и наблюдаемые величины

Далее мы обратимся к полному квантовомеханическому решению задачи об эволюции электронных состояний в двойной КТ со СОВ, на которую воздействует электрическое поле в форме одиночных импульсов [141], [142], [239]. Мы рассмотрим электроны в GaAs в потенциале двойной КТ меньшего размера, где туннелирование между двумя КТ существенно. Схема уровней отвечает рис.2.1 со следующими параметрами: расстояние до минимума потенциала $d = 25\sqrt{2}$ нм, высота барьера $U_0=10$ мэВ, что обеспечивает туннельное расщепление между двумя нижними уровнями $E_2-E_1=\Delta E_g=0.092$ мэВ. Задача о нестационарной эволюции решается нами в несколько этапов. Вначале мы решаем стационарную задачу с гамильтонианом H_0+H_{SO} , где

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) + \frac{1}{2}g\mu_B\sigma_z B_z,$$
 (2.10)

собственные функции которого можно записать как $\varphi_n |\sigma\rangle$, где *n* есть орбитальное число (номер уровня размерного квантования), а $|\sigma\rangle$ есть двухкомпонентные спиноры (1, 0) и (0, 1), имеющие спиновую проекцию $\sigma = \pm 1$ на направление магнитного поля B_z . Мы выбираем значение $B_z=2$ Т, что для g=-0.45 даёт нам зеемановское расщепление уровней $\Delta_z=0.054$ мэВ, почти вдвое меньшее по сравнению с туннельным расщеплением Δ_t . В гамильтониане СОВ H_{SO} теперь мы будем учитывать вклады и Дрессельхауза, и Рашбы:

$$H_{SO} = \frac{1}{\hbar} \left(\beta \sigma_x + \alpha \sigma_y \right) p_x.$$
(2.11)
Мы используем типичные параметры СОВ для электронов в GaAs: $\beta=3$ мэВ·нм и $\alpha=10$ мэВ·нм. Далее мы диагонализуем гамильтониан H_0+H_{SO} в базисе собственных функций $\varphi_n|\sigma>$ гамильтониана (2.10). В результате мы получаем новый базис

$$|\psi_n(x)\rangle = (\psi_{n1}(x), \psi_{n2}(x)),$$
 (2.12)

состояниям которого которым отвечают двухкомпонентные спиноры с обоими ненулевыми компонентами, уже не описывающие спин, строго параллельный или антипараллельный магнитному полю из-за присутствия СОВ. Тем не менее, эти состояния имеют доминирующую *z*-проекцию спина. Для нижних четырёх состояний $|\psi_1>,...,|\psi_4>$ с энергиями $E_1,...,E_4$, которые дают основной вклад в эволюцию в нашей задаче, проекции спина образуют последовательность $|\uparrow>, |\downarrow>$, $|\uparrow>, |\downarrow>$. Для решения нестационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом $H_0+H_{SO}+V(x,t)$ в присутствии потенциала электрического поля

$$V(x,t) = -F(t)x \tag{2.13}$$

мы записываем волновую функцию в виде разложения по базису (2.12) с подлежащими определению коэффициентами $C_n(t)$, зависящими от времени:

$$\left|\Psi(x,t)\right\rangle = \sum_{n} C_{n}(t) e^{-iE_{n}t/\hbar} \left|\psi_{n}(x)\right\rangle.$$
(2.14)

Эволюция системы в базисе (2.12) в присутствии электрического поля с потенциалом (2.13) определяется системой обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $C_n(t)$:

$$\frac{dC_n(t)}{dt} = i \frac{F(t)}{\hbar} \sum_l C_l(t) x_{nl} \, e^{-i(E_l - E_n)t/\hbar} \,, \qquad (2.15)$$

где $x_{nl} = \langle \psi_n | x | \psi_l \rangle$ есть матричные элементы оператора координаты, которые в присутствии СОВ связывают между собой даже состояния с доминирующей противоположной проекцией спина $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$. Система (2.15) должны быть дополнена начальными условиями $C_n(0)$, определяющими начальную координату и спин электрона. В данной задаче мы будем использовать начальные условия для электрона, локализованного в левой КТ, чему при условии $\Delta_Z \langle \Delta_t$ будут соответствовать начальные условия

$$C_1(0) = C_3(0) = 1/\sqrt{2}$$
 (2.16a)

для состояния со спином вверх или

$$C_2(0) = C_4(0) = 1/\sqrt{2}$$
 (2.166)

для состояния со спином вниз соответственно, а остальные $C_n(0)=0$. При численном решении системы (2.15) мы учитываем до 20 уровней в двойной КТ с энергиями до 42 мэВ, хотя доминирующий вклад вносят нижние четыре (с учётом спина) уровня $E_1,...,E_4$ с энергиями до 4.1 мэВ. Основными величинами для расчёта являются плотность вероятности

$$\rho(x, t) = \Psi^{+}(x, t) \cdot \Psi(x, t)$$
(2.17)

и спиновая плотность для *i*-й проекции спина

$$S_i(x, t) = \Psi^+(x, t) \cdot \sigma_i \Psi(x, t).$$
(2.18)

С ними связаны ещё две наблюдаемые величины: вероятность обнаружить электрон в правой КТ

$$w_R(t) = \int_0^\infty \rho(x,t) dx \tag{2.19}$$

и среднее значение для *i*-й проекции спина по области правой КТ

$$\sigma_i^R(t) = \int_0^\infty S_i(x,t) dx.$$
(2.20)

Рассмотрим вначале эволюцию в отсутствие электрического поля для начального состояния (2.16а) в левой КТ со спином вверх. Динамика проекций спина (2.20) в правой КТ вверх показана на рис.2.5 в магнитном поле $B_z=2$ Т и при значении $\beta=0$, т.е. при СОВ Рашбы. Можно видеть, что все три проекции спина осциллируют на периоде $T_R\sim50$ пс, отвечающем частоте Раби для начального состояния (2.16а). Осцилляции вероятности (2.19), не показанные на рис.2.5, очень близки по форме к осцилляциям $\sigma_z^R(t)$ [141].



Рисунок 2.5. Свободная эволюция средних значений проекций спина (2.20) в правой КТ для начального состояния со спином вверх в левой КТ. Наблюдаются осцилляции на периоде Раби $T_{\rm R}$ ~50 пс [141].

Из рис.2.5 можно сделать вывод, что туннелирование само по себе в данном случае не приводит к перевороту спина, поскольку осцилляции $\sigma_z^R(t)$ остаются в области неотрицательных значений. Таким образом, для переворота спина нужно ненулевое электрическое поле с потенциалом (2.13).

2.2.2. Эволюция в импульсном электрическом поле

Мы будем рассматривать динамику системы (2.15) под действием одиночного импульса электрического поля

$$F(t) = e\mathcal{E}_0 \sin(\pi t/T), \qquad (2.21)$$

Поле (2.21) действует на систему в течение времени 0 < t < T, где $T = T_R/2$ определяется периодом Раби-осцилляций T_R на рис.2.5, откуда T=25 пс. Амплитуда электрического поля удобно описывать безразмерным параметром f, определяемом из соотношения

$$e\mathcal{E}_0 = f \cdot U_0 / 2d, \qquad (2.22)$$

где величина f определяет соотношение между энергией $2e\mathcal{E}_0d$, приобретаемой электроном в однородном поле на масштабе КТ 2d, и высотой барьера U_0 . Значение f << 1 отвечает слабому электрическому полю, значение f > 1 соответствует сильному полю. Рассмотрим пример эволюции вначале в пространстве состояний (2.12), т.е. динамику $|C_n(t)|^2$, описывающих заселённость уровней. Параметры задачи следующие: магнитное поле $B_z=2$ T, амплитуды СОВ $\beta=3$ мэВ·нм и $\alpha=10$ мэВ·нм, амплитуда электрического поля f=1/2, начальное состояние со спином вниз из (2.16б). Результаты показаны на рис.2.6. Можно видеть, что вклад от состояния со спином вниз, описываемый $|C_2(t)|^2$ и $|C_4(t)|^2$, сопровождается заметным растущим вкладом от $|C_1(t)|^2$, т.е. вкладом от состояния со спином вверх. Таким образом, импульс электрического поля приводит по крайней мере к частичному перевороту спина.

Обратимся к эволюции наблюдаемых величин на примере вероятности $w_R(t)$ и спиновой проекции $\sigma_z^R(t)$. На рис.2.7 показаны графики для этих величин при амплитуде электрического поля f=1/8 (чёрная пунктирная кривая), f=1/2 (красная кривая) и f=2 (синяя кривая), если начальное состояние есть состояние (2.16а) со спином вверх.



Рисунок 2.6. Эволюция заселённостей уровней $|C_1(t)|^2$, $|C_2(t)|^2$ и $|C_4(t)|^2$ в магнитном поле $B_z=2$ Т при воздействии импульса электрического поля (2.21) с T=25 пс и амплитудой из (2.22) f=1/2. Вклад от начального состояния со спином вниз, описываемый $|C_2(t)|^2$ и $|C_4(t)|^2$, сопровождается заметным растущим вкладом от $|C_1(t)|^2$, т.е. вкладом от состояния со спином вверх [141].



Рисунок 2.7. Эволюция (а) вероятности $w_R(t)$ и (b) спиновой проекции $\sigma_z^R(t)$ для начального состояния в левой КТ со спином вверх при амплитуде поля f=1/8 (чёрная пунктирная кривая), f=1/2 (красная кривая) и f=2 (синяя кривая) [141].



Рисунок 2.8. То же, что на рис.2.7, но для начального состояния в левой КТ со спином вниз. Красная кривая при *f*=1/2 отвечает эволюции заселённостей уровней на рис.2.6 [141].

На рис.2.8 эволюция для этих же параметров показана для начального состояния (2.16б) со спином вниз. Красная кривая при f=1/2 (красная кривая) на рис.2.8 отвечает эволюции заселённостей уровней на рис.2.6. Из рис.2.7 и рис.2.8 можно сделать вывод, что с ростом амплитуды поля f увеличивается как глубина переворота спина, так и степень нерегулярности динамики, что иллюстрируется растущей амплитудой высокочастотного заполнения для кривых $\sigma_z^R(t)$. Наиболее важным наблюдением из сравнения рис.2.7 и рис.2.8 является различный характер эволюции вероятности $w_R(t)$ и спиновой проекции $\sigma_z^R(t)$ в зависимости от начальной спиновой проекции в левой КТ. Действительно, эти рисунки отличаются только начальной проекцией спина. Объяснение заключается в различном расстоянии между уровнями с разной проекцией спина и разной пространственной чётностью. Чем это расстояние больше, тем менее эффективно СОВ воздействует на динамику спина. Если рассматривать низшее состояние со спином вверх, то это состояние E_1 и надо взять расстояние между уровнями E_1 и E_4 , равное $\Delta E_g + \Delta_Z$ (см. рис.2.1). Если мы берём низшее состояние со спином вниз, то это E_2 и надо взять более близкое к нему состояние E_3 , расстояние до которого меньше и равно $\Delta E_g - \Delta_Z$. В поле $B_z=2$ Т отношение этих расстояний равно 0.25, что говорит о существенно большем влиянии СОВ на динамику начального состояния со спином вниз, что и подтверждает сравнение рис.2.7 и рис.2.8. Отметим, что различия в спиновой поляризации начального состояния влияют не только на динамику спина, но и на эволюцию вероятности туннелирования, как это видно из сравнения панелей (а). Это говорит о взаимном влиянии спина и туннелирования при наличии сильного СОВ.

Ещё больше деталей эволюции можно увидеть, рассматривая динамику спиновой плотности (2.18) для проекции спина $S_z(x, t)$. На рис.2.9 показана карта эволюции $S_z(x, t)$ в переменных (x, t) для сильного поля f=2 и для двух значений времени импульса T=12 пс (вверху) и T=25 пс (внизу).



Рисунок 2.9. Карта эволюции $S_z(x, t)$ в переменных (x, t) для сильного поля f=2 и для двух значений времени импульса T=12 пс (вверху) и T=25 пс (внизу) [141].

Начальное состояние на рис.2.9 отвечает спину вниз в левой КТ. Отчёт времени ведётся с момента t=20 пс, когда действие импульса полностью закончилось (верхняя панель) или почти закончилось (нижняя панель). Жёлтые участки карты отвечают перевёрнутому спину, красные – исходному. В области x=d в центре правой КТ вдоль вертикальной оси времени наблюдаются осцилляции Раби с чередующимися оттенками. Можно видеть, что для верхней панели с более коротким импульсом доля жёлтых участков в области x=d в центре правой КТ больше, чем для более длинного импульса на нижней панели. Эти результаты говорят о том, что чересчур сильный или чересчур длинный импульс может «перекрутить» спин настолько, что эффективный поворот на угол π может быть

пропущен. Таким образом, для эффективного управления спином при импульсном воздействии электрическим полем через СОВ необходимо подбирать как амплитуду, так и время действия импульса.

Представляет интерес динамика под действием импульса (2.21) с иной продолжительностью $T=T_Z/2$, резонансно связанной с зеемановским периодом [142]

$$T_Z = 2\pi\hbar/\Delta_Z. \tag{2.23}$$

Магнитное поле будет выбираться следующим образом. Рассмотрим две различных конфигурации уровней на рис.2.10, отвечающих случаю $\Delta_Z = \Delta E_g /2$ при $B_z=1.73$ Т и $T_Z=90$ пс (слева), а также $\Delta_Z=2$ ΔE_g при $B_z=6.93$ Т и $T_Z=22$ пс (справа) при прежних параметрах потенциала $d = 25\sqrt{2}$ нм и $U_0=10$ мэВ. Для такой эквидистантной последовательности уровней с различным порядком спиновых проекций, показанных стрелками на рис.2.10, эффективно реализуются режимы переворота спина с туннелированием в периодическом поле, как мы увидим в следующем параграфе.



Рисунок 2.10. Конфигурация уровней для $\Delta_Z = \Delta E_g / 2$ при $B_z = 1.73$ Т (слева) и $\Delta_Z = 2\Delta E_g$ при $B_z = 6.93$ Т (справа) при прежних параметрах потенциала $d = 25\sqrt{2}$ нм и $U_0 = 10$ мэВ. Стрелки показывают *z*-проекции спина [143].

Рассмотрим воздействие одиночного импульса на состояние (2.16а) со спином вверх в левой КТ сравнительно слабым электрическим полем с f=1/8. Результаты для эволюции показаны на рис. 2.11, где время действия импульса $T=T_Z/2$

отмечено красной вертикальной прямой. Чёрная кривая показывает вероятность туннелирования $w_R(t)$, красная и синяя кривые показывают спиновые проекции $\sigma_x^R(t)$ и $\sigma_v^R(t)$.



Рисунок 2.11. Динамика вероятности туннелирования $w_R(t)$, (чёрная кривая) и спиновых проекций $\sigma_x^R(t)$ и $\sigma_y^R(t)$ под действием одиночного импульса (2.21) с $T=T_Z/2$ и слабой амплитудой f=1/8 в магнитном поле с $\Delta_Z=\Delta E_g/2$ при $B_z=1.73$ Т (вверху) и $\Delta_Z=2\Delta E_g$ при $B_z=6.93$ Т (внизу). Динамика $\sigma_z^R(t)$ повторяет $w_R(t)$, т.е. наблюдается туннелирование без переворота спина [142].

Третья проекция $\sigma_z^R(t)$ в правой КТ на указанных временах в целом повторяет зависимость $w_R(t)$, т.е. спин не переворачивается. Из рис.2.11 можно сделать вывод, что на масштабе времени порядка T_Z успевает развиваться только туннелирование без заметной спиновой динамики, прежде всего без переворота спина. Таким образом, одиночные импульсы длительности T с небольшой

амплитудой f не слишком эффективны для переворота спина даже при резонансном условии $T=T_Z/2$. Более эффективным является воздействие периодическим электрическим полем, к описанию результатов которого мы перейдём в следующем параграфе.

2.3. Динамика туннелирования и спина в периодическом электрическом поле: очень медленные осцилляции Раби

2.3.1. Эволюция на малых временах

В этом параграфе мы рассматриваем периодическое электрическое поле с потенциалом (2.13) на частоте $\omega_Z = \widetilde{\Delta}_Z / \hbar$ зеемановского расщепления уровней [143], [238], [239],

$$F(t) = e\mathcal{E}_0 \sin(\omega t), \qquad (2.24)$$

где частота $\omega = \omega_Z$ найдена уже учётом фактического расщепления уровней $\widetilde{\Delta}_Z$ в присутствии СОВ (2.11), хотя отличие $\widetilde{\Delta}_Z$ от определяемого зеемановским членом расщепления Δ_Z в нашей модели невелико (несколько процентов). Мы рассматриваем ту же модель на рис.2.1 с теми же параметрами гамильтониана в двойной КТ что и в предыдущем параграфе 2.2, включая схему расположения уровней в магнитном поле на рис.2.10 для двух значений магнитного поля и зеемановского периода T_Z из (2.23): $\Delta_Z = \Delta E_g / 2$, $B_z = 1.73$ Т и $T_Z = 90$ пс (слева на рис.2.10) и $\Delta_Z=2$ ΔE_g , $B_z=6.93$ Т и $T_Z=22$ пс (справа на рис.2.10). Таким образом, в этом параграфе рассматривается задача об электрическом дипольном спиновом резонансе (ЭДСР), обзор литературы по которой представлен в параграфе 1.2. Эквидистантная структура уровней на рис.2.10 в поле $B_z=1.73$ Т при $\Delta_z=\Delta E_g/2$ определяет резонансное вовлечение всех четырёх уровней на частоте ЭДСР при $\hbar\omega = \Delta_Z$, поскольку все четыре уровня отстоят на Δ_Z , в то время как при $B_z = 6.93$ Т выполняется условие $\Delta_Z=2$ ΔE_g и резонанс имеет место лишь для двух уровней с противоположной проекцией спина. Тем не менее, благодаря разрешённым переходам между уровнями с одинаковой проекцией спина и остальные два уровня на правой схеме на рис.2.10 также оказываются вовлечены в динамику,

как мы увидим ниже. В отличие от предыдущего параграфа здесь нас будет интересовать динамика средних значений координаты и спина, отвечающих вкладу обеих КТ:

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x, t) dx, \qquad (2.25)$$

$$\sigma_i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S_i(x,t) dx. \qquad (2.26)$$

Мы начнём исследование влияния периодического поля (2.24) на коротких временах на нескольких зеемановских периодах (2.23). Начальное состояние для системы (2.15) будет совпадать с основным состоянием системы, т.е. $C_1(0)=1$, $C_{n>1}(0)=0$, что отвечает чётной орбитальной части волновой функции с x(0)=0 и проекции спина $\sigma_z(0) = +1$. Рассмотрим воздействие сравнительно слабого электрического поля с амплитудой из (2.22) f=0.1. Результаты для эволюции средних значений x(t) и $\sigma_x(t)$ показаны на рис.2.12 на временах $0 < t/T_Z < 4$ для (а) $B_z=1.73$ Т (при $\Delta_z=\Delta E_g/2$) и (b) $B_z=6.93$ Т (при $\Delta_z=2$ ΔE_g). На рис.2.12 можно видеть, что даже на таких малых временах и в слабом электрическом поле среднее значение координаты x(t)/d меняется в достаточно широких пределах от -1 до 1, т.е. практически по всей области двойной КТ. Проекция же спина $\sigma_x(t)$ (и не показанная, но сходно ведущая себя $\sigma_v(t)$) меняется в гораздо более узком интервале, хотя на панели (b) видно, что со временем её амплитуда имеет тенденцию к росту. Что касается наиболее интересной для нас проекции спина $\sigma_{x}(t)$, то она меняется ещё значительно медленнее, чем $\sigma_{x}(t)$, что требует рассмотрения большого числа периодов электрического поля. Поэтому для её исследования достаточно ограничиться дискретным шагом по времени

$$t=NT_Z,$$
 (2.27)

построив модель эволюции в рамках теории Флоке.



Рисунок 2.12. Эволюция средних значений x(t) и $\sigma_x(t)$ для периодического поля (2.24) с амплитудой (2.22) f=0.1 на временах $0 < t/T_Z < 4$ для (a) $B_z=1.73$ Т (при $\Delta_Z=\Delta E_g/2$) и (b) $B_z=6.93$ Т (при $\Delta_Z=2\Delta E_g$) [143].

2.3.2. Теория Флоке

В теории Флоке [116], [80], [81], [47], [215] вектор состояния системы $\vec{C}(NT_Z) = (C_1, ..., C_N)$ в дискретный момент времени (2.27) может быть получен из начального состояния $\vec{C}(0)$ путём воздействия оператора трансляций на N периодов:

$$\vec{C}(NT_Z) = U(NT_Z)\vec{C}(0), \qquad (2.28)$$

где оператор $U(NT_Z)=(U(T_Z))^N$ трансляции на N периодов может быть сконструирован вместе с оператором трансляции на один период $U(T_Z)$. Именно, если мы выбираем в качестве начального условия состояние с $C_k(0)=\delta_{kn}$, то после решения (обычно численного) системы (2.15) на одном периоде $0 < t < T_Z$ мы получаем n-й столбец матрицы-пропагатора $U_{ln}(T_Z)$, описывающей эволюцию системы на одном периоде электрического поля. Перебрав все $n=1...N_f$, где N_f есть

число состояний, участвующих в динамике, мы построим матрицу $U_{ln}(T_Z)$ размером $N_f x N_f$. Число N_f на практике определяется фактически вовлечёнными в эволюцию состояниями, но, вообще говоря, оно должно описывать с достаточной степенью точности полную систему базисных функций. Собственные значения E_Q матрицы $U_{ln}(T_Z)$ представляют собой квазиэнергии, а собственные векторы A^Q_{l} , образующие ортонормированный базис, являются квазиэнергетическими функциями в представлении гамильтониана H_0+H_{SO} , в котором записана система уравнений эволюции (2.15). С их помощью матрица оператора эволюции на один период может быть записана как [116], [81], [47], [215]

$$U_{\rm ln}(T_Z) = \sum_{Q} A_l^Q \left(A_n^Q \right)^* e^{-iE_Q T_Z / \hbar} .$$
 (2.29)

В силу ортонормированности векторов A^{Q_l} матрица оператора $U(NT_Z)=(U(T_Z))^N$ трансляции на N периодов может быть построена по аналогии с (2.29) как

$$U_{\rm ln}(NT_Z) = \sum_Q A_l^Q (A_n^Q)^* e^{-iE_Q NT_Z/\hbar} .$$
 (2.30)

Таким образом, в методе Флоке необходимо по возможности точно решать систему (2.15) только на одном периоде эволюции для построения матрицы оператора $U_{ln}(T_Z)$. После этого находятся её собственные значения E_Q и собственные векторы A^Q_l , позволяющие найти матрицу (2.30) оператора эволюции на любое целое число периодов через конечное число алгебраических операций, что позволяет построить эволюцию системы в стробоскопические моменты времени (2.27).

2.3.3. Стробоскопическая динамика на больших временах

Мы начнём исследование стробоскопической динамики на большом числе периодов с результатов по эволюции среднего значения координаты x(t)/d, показанного на рис.2.13 для нашего обычного в этом и предыдущем параграфах магнитного поля (a) $B_z=1.73$ T (при $\Delta_Z=\Delta E_g/2$) и (b) $B_z=6.93$ T (при $\Delta_Z=2\Delta E_g$), отвечающего эквидистантной картине уровней на рис.2.10. Амплитуда электрического поля в (2.22) f=0.35, что отвечает умеренному по величине полю.



Рисунок 2.13. Стробоскопическая эволюции среднего значения координаты x(t)/d для (a) B_z =1.73 T и (b) B_z =6.93 T, отвечающего эквидистантной картине уровней на рис.2.10. Амплитуда электрического поля (2.22) *f*=0.35. Динамика x(t)/d является непериодической и амплитуда её изменения существенно меньше, чем характерный размер *d* области одной КТ, и меньше, чем в более слабом поле *f*=0.1 на рис.2.12 [143].

На рис.2.13 можно видеть, что динамика среднего значения координаты является непериодической и амплитуда её изменения существенно меньше, чем характерный размер *d* области одной КТ, и меньше, чем в более слабом поле *f*=0.1 на рис.2.12. Это означает, что полного туннелирования между двумя КТ с ростом амплитуды поля не происходит, хотя время наблюдения на рис.2.13 существенно превосходит время свободного туннелирования $2\pi\hbar/\Delta E_g$ для каждого из магнитных полей. Подобное ослабление туннелирования в периодическом поле можно рассматривать как одно из проявлений эффектов когерентного разрушения

туннелирования (CDT) [117], [116], которое наблюдалось и для «замораживания», т.е. замедления спиновой степени свободы в переменном магнитном поле [114]. Также на рис.2.13 можно отметить существенное различие в поведение зависимости x(t)/d на панелях (а) и (b), которые отвечают одной и той же амплитуде электрического поля, но разным значениям магнитного поля, т.е. разной спиновой структуре уровней на рис.2.10. Это является ещё одним свидетельством влияния спина на пространственные степени свободы.

Обратимся к спиновой динамике в периодическом поле. На рис.2.14 показана стробоскопическая зависимость среднего значения $\sigma_z(t=NT_Z)$ из (2.26) для тех же двух значений магнитного поля (a) $B_z=1.73$ T (при $\Delta_Z=\Delta E_g/2$) и (b) $B_{z}=6.93$ Т (при $\Delta_{z}=2\Delta E_{o}$), отвечающего картине уровней на рис.2.10. Приведены результаты для амплитуды электрического поля (2.22) f=0.02 (чёрная кривая), 0.15 (красная кривая), 0.35 (синяя кривая). На панели (а) вертикальная пунктирная линия T_{sf} обозначает период переворота спина для кривой с f=0.02. Значение T_{sf} определяется нами как время между двумя последовательными максимумами на графике $\sigma_z(NT_z)$. Основной особенностью эволюции спиновой проекции на рис.2.14 является немонотонный характер скорости переворота спина, т.е. частоты Раби $\Omega_{\rm R}=2\pi/T_{sf}$, от амплитуды электрического поля. В простой двухуровневой системе согласно (1.15) при выполнении резонансного условия $\hbar\omega = \Delta_7$ зависимость Ω_R от амплитуды поля *f* является линейной. Представляет интерес исследовать зависимость $\Omega_{\rm R}(f)$ в широком интервале амплитуды электрического поля. Такая зависимость в единицах $100T_Z/T_{sf}$ приведена на рис.2.15 в интервале 0<f<0.5, т.е. для слабого и умеренного поля. Для сравнения линия L показывает линейную зависимость частоты Раби $\hbar\Omega_R = V_{kn}$ при точном резонансе в строго двухуровневой системе.



Рисунок 2.14. Стробоскопическая эволюции среднего значения проекции спина $\sigma_z(t)$ для (a) B_z =1.73 T и (b) B_z =6.93 T, отвечающего эквидистантной картине уровней на рис.2.10. Амплитуда электрического поля *f*=0.02 (чёрная кривая), 0.15 (красная кривая), 0.35 (синяя кривая). Скорость спиновой динамики показывает немонотонную зависимость от амплитуды электрического поля, полный переворот спина до $\sigma_z(t)$ =-1 в сильном поле не наблюдается. [143].

Для рассматриваемых в этом и предыдущем параграфе параметров типичные значения частоты переворота спина на рис.2.15 составляют около 50 МГц на панели (а) и 400 МГц на панели (b) рис.2.15. Основной чертой результатов на рис.2.15 является сильно нелинейная зависимость частоты переворота спина от амплитуды поля *f*. Если на панели (а) ещё можно выделить усреднённую линейную составляющую, то на панели (b) она отсутствует. На панели (а) динамика отвечает случаю, когда все четыре уровня на левой части рис.2.10 попадают в резонанс при $\hbar \omega = \Delta_z$, в то время как на панели (b) в резонансе находятся лишь два уровня (первый и третий снизу на правой части рис.2.10). Тем не менее, за счёт нерезонансных переходов между с участием двух остальных уровней вся четвёрка уровней справа на рис.2.10 участвует в динамике, что приводит к существенно нелинейной зависимости Ω_R от амплитуды поля. Больше того, её увеличение в интервале [0, 0.5], как это особенно ярко видно на панели (b) рис.2.15, не приводит в среднем к росту Ω_R , т.е. переворот спина в сильном поле может и замедляться.



Рисунок 2.15. Нелинейная зависимость частоты Раби переворота спина T_Z/T_{sf} в многоуровневой системе как функция безразмерной амплитуды внешнего поля *f* в условиях ЭДСР при $\hbar\omega = \Delta_Z$ для двойной квантовой точки, помещённой в магнитное поле (а) при $\Delta_Z = \Delta E_g/2$, где ΔE_g есть туннельное расщепление основной пары уровней и (b) при $\Delta_Z = 2\Delta E_g$. Справа показаны конфигурации уровней и проекции спина. Частота Раби переворота спина достигает 50 МГц на панели (а) и 400 МГц на панели (b) [143].

Замедление спиновой динамики при наличии СОВ в многоуровневой системе можно трактовать как проявление квантового эффекта Зено в замедлении

эволюции измеряемой величины, что имеет место при замедлении переходов между состояниями при частых измерениях [248], [93], [243], [244]. Именно, если рассмотреть воздействие оператора СОВ $H_{SO} = -i\alpha\sigma_i\partial/\partial x$ на когерентную суперпозицию ψ двух спиновых состояний $\xi_1|1 > \mu \xi_{-1}|-1 > c \xi_{\pm 1} = \pm 1$, имеющих некоторую общую координатную волновую функцию $\phi(x)$, т.е. на функцию $\phi(x)(\xi_1|1 > + \xi_{-1}|-1 >)$, то для простого примера $\sigma_i = \sigma_z$ мы получим, что его вклад в эволюцию имеет вид [143]

$$e^{-i\frac{H_{SO}t}{\hbar}}\psi = e^{-\frac{\alpha t}{\hbar}\sigma_z\frac{\partial}{\partial x}}\varphi(x)(\xi_1|1\rangle + \xi_{-1}|-1\rangle) =$$

$$= \varphi(x - \alpha t/\hbar)\xi_1|1\rangle + \varphi(x + \alpha t/\hbar)\xi_{-1}|-1\rangle.$$
(2.31)

Результат в правой части (2.31) означает, что СОВ, связывая орбитальную и спиновую степень свободы, разрушает когерентную суперпозицию состояний |1> и |-1>, выполняя в смысле фон Неймана измерение проекции σ_z [93], [243], [244], связывая её с пространственным положением электрона. В результате когерентная, синхронная динамика двух спиновых компонент, как это видно из (2.31), оказывается разрушенной и становится зависящей от координаты, что в рассмотренных в этом параграфе задачах отражается в замедлении спиновой эволюции.

2.4. Динамика координаты и спина в квантовом биллиарде со СОВ

Нашей следующей задачей будет исследование координатной и спиновой динамики в массивной КТ со СОВ, где в эволюции участвует большое число состояний. Такие системы называют иногда квантовыми биллиардами по аналогии с классическими двумерными системами, демонстрирующими хаотическую динамику при движении внутри них упруго взаимодействующих частиц. Нашей целью среди прочего будет проследить связь, т.е. корреляцию, между координатной и спиновой степенями свободы и её изменение с ростом степени нерегулярности динамики.

Регулярная и хаотическая динамика успешно изучаются как в классических, так и в квантовых системах. Не ставя цель описывать здесь всё многообразие

методов, остановимся лишь на некоторых особенностях проявления нерегулярной, хаотической динамики в квантовых системах [119], [47], [215]. В квантовой для систем с классическим хаотическим аналогом механике наблюдается непуассоновская статистика уровней, имеющая минимум при расстоянии между уровнями $\Delta E = E_{l-1} \rightarrow 0$, т.е. наблюдается расталкивание уровней. Именно, для классически хаотической системы пуассоновская статистика уровней *P*(*s*)=*e*^{-*s*} для расстояния между уровнями сменяется вигнеровской статистикой $P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-(\pi/4)s^2}$. Далее, в квантовом случае динамическим аналогом стохастической эволюции является так называемая квантовая диффузия Арнольда [80], [81], [83], [29], при которой среднее число уровней $\Delta L(t)$, вовлечённых в эволюцию, растёт со временем. Поскольку зависимость $\Delta L(t)$, как правило, имеет тенденцию к насыщению, проявления хаоса в квантовой эволюции имеют чаще временный характер, и по мере ΔL_{max} достижения некоторого максимального динамика приобретает стационарный характер, хотя и может быть весьма сложной с точки зрения, например, Фурье-спектров для эволюции наблюдаемых величин.

Известно, что при добавлении СОВ в гамильтониан интегрируемая система с регулярной динамикой, такая как прямоугольный биллиард, становится неинтегрируемой, в частности, статистика её уровней демонстрирует признаки [56], вигнеровского распределения а статистика собственных функций существенно зависит от амплитуды СОВ [7], [68]. СОВ вносит свои особенности и в проводимость квантового биллиарда, если у него присутствуют электроды источника и стока [67], [30], [31]. Представляет интерес увидеть, каким образом в такой системе с вигнеровским спектром протекает динамика для координатной и спиновой степени свободы, какова мера её нерегулярности и как связаны между собой (т.е. в какой степени коррелируют) средние значения для координат и спиновых проекций.

2.4.1. Модель и статистические параметры эволюции

В данном параграфе мы рассмотрим эволюцию состояний в периодическом электрическом поле для двумерной КТ в двумерном электронном газе в GaAs [145]. Форма КТ представляет собой прямоугольник со сторонами a и bсоответственно. Пусть в системе имеется постоянное магнитное поле B_x в плоскости (*xy*) двумерного электронного газа и СОВ Рашбы. Гамильтониан задачи имеет вид

$$H = H_0 + H_{SO} + xF \cos \omega t, \qquad (2.32)$$

где в приближении эффективной массы

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}g\mu_B\sigma_x B_x$$
(2.33)

И

$$H_{SO} = \frac{\alpha_R}{\hbar} \left(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x \right). \tag{2.34}$$

Мы считаем стенки КТ при x=0, a и y=0, b непроницаемыми и принимаем граничное условие ψ (стенка)=0. Это граничное условие не является единственно возможным, однако более тонкий его выбор может изменить структуру волновой функции прежде всего вблизи границы, но не в объёме КТ, в котором будут разворачиваться основные события в нашей задаче. Волновые функции стационарной задачи без электрического поля имеют вид двухкомпонентных спиноров с дискретным квантовым числом n ([56]),

$$\psi_n(x,y) = \sum_{l_x,l_y} \binom{a_{l_xl_y}}{b_{l_xl_y}}_n \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(\frac{\pi l_x x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi l_y y}{b}\right), \qquad (2.35)$$

где коэффициенты $a_{l_x l_y}$ и $b_{l_x l_y}$ находятся при численной диагонализации гамильтониана H_0+H_{SO} . Для описания спектра и амплитуды электрического поля полезно ввести следующие параметры. Рассмотрим спектр гамильтониана H_0 из (2.33):

$$E_0(l_x, l_y, \sigma = \pm 1) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{l_x^2}{a^2} + \frac{l_y^2}{b^2} \right) + \frac{1}{2} \sigma g \mu_B B_x, \qquad (2.36)$$

и в квазиклассическом приближении $l_x >> 1$ оценим расстояние между уровнями

$$\Delta E_0 = E(l_x + 1, l_y, \sigma) - E(l_x, l_y, \sigma) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2} l_x.$$
(2.37)

Для оценки величины СОВ мы введём параметр, равный отношению матричного элемента *H*_{SO} между состояниями с соседними орбитальными числами и разным спиновым числом к расстоянию (2.37):

$$f_{SO} = \frac{\left| \left\langle l_x + 1, l_y, 1 \mid H_{SO} \mid l_x, l_y, -1 \right\rangle \right|}{\Delta E_0} = \frac{2\alpha_R m a}{\pi^2 \hbar^2},$$
(2.38)

которое по порядку величины есть отношение линейного размера КТ a к длине L_{SO} спиновой прецессии (1.12). Для оценки амплитуды электрического поля $F=e\mathcal{E}$ мы поступим аналогично и введём параметр

$$f_{\varepsilon} = \frac{\left| \left\langle l_x + 1, l_y, 1 \mid F \mid l_x, l_y, 1 \right\rangle \right|}{\Delta E_0 l_x^{-1}} = \frac{2Fma^3}{\pi^4 \hbar^2}, \qquad (2.39)$$

который по порядку величины отвечает отношению энергии *Fa*, приобретаемой в однородном электрическом поле на масштабе КТ *a*, к энергии основного состояния (2.36) в нулевом магнитном поле.

В присутствии периодического электрического поля с гамильтонианом (2.32) мы будем искать волновую функцию в виде разложения по собственным функциям (2.35) стационарной части гамильтониана,

$$\psi(x, y, t) = \sum_{n} C_n(t) \psi_n(x, y).$$
(2.40)

Частота периодического поля выбирается нами из условия локального резонанса

$$\hbar\omega_0 = E_{n_0} - E_{n_0-1} \tag{2.41}$$

для некоторой пары уровней с соседними квантовыми числами n_0 и n_0-1 . Поскольку в системе присутствует СОВ и магнитное поле в плоскости двумерного электронного газа, резонанс (2.41) трудно назвать чисто орбитальным либо чисто спиновым. Динамика в переменном поле может быть описана в терминах эволюции в гильбертовом пространстве базисных состояний, фигурирующих в разложении (2.40). Введём среднее значение $\overline{L}(t)$ для номера базисного состояния и его дисперсию через

$$\overline{L}(t) = \sum_{L} L |C_{L}(t)|^{2}, \quad \overline{\Delta^{2} L(t)} = \sum_{L} (L - \overline{L}(t))^{2} |C_{L}(t)|^{2}. \quad (2.42)$$

В режиме хаотической динамики значение среднего квадратичного уклонения $\Delta L(t) = \sqrt{\Delta^2 L(t)}$ возрастает со временем, отвечая квантовой диффузии Арнольда.

2.4.2. Результаты для динамики плотностей вероятности, спиновой проекции и их коррелятора

Динамика рассматривается нами для КТ с размерами a=2.1 мкм, b=1.5 мкм (как в работе [56]) и при $\alpha_R=5$ мэВ·нм. Для таких параметров значение f_{SO} из (2.38) равно ~2.0. Значение магнитного поля выбирается нами как $B_x=500$ Гс, что отвечает зеемановскому расщеплению $\Delta_Z=1.3$ мкэВ. Мы выбираем частоту резонанса (2.41) для уровня с номером $n_0=200$, для которого расстояние до соседнего уровня отвечает линейной частоте v=0.78 ГГц.

На рис.2.16(а),(b) показана зависимость от времени, измеряемом числом периодов N электрического поля, для среднего квадратичного уклонения $\Delta L(t)$ числа состояний L. Панель (a) отвечает умеренной амплитуде электрического поля $\mathcal{E}=0.14$ В/см и числу $f_e=2.3$, панель (b) отвечает более сильному полю с $\mathcal{E}=0.70$ В/см и $f_e=11.5$. На панелях (c), (d) рис.2.16 показаны соответствующие квадраты амплитуд Фурье-спектра $I_{\sigma_z}(\omega) = |\sigma_z(\omega)|$ для эволюции спиновой проекции $\sigma_z(t)$. Частота указана в единицах резонансной частоты (2.41). Из рис.2.16 можно сделать вывод, что начальный этап эволюции характеризуется ростом среднего квадратичного уклонения $\Delta L(t)$, т.е. хаотическим режимом динамики. По прошествии 30-50 периодов поля зависимость $\Delta L(t)$ выходит на насыщение, т.е. хаотический режим сменяется регулярным. Число уровней, вовлекаемое в динамику, т.е. амплитуда $\Delta L(t)$, ожидаемо больше на панели (b), отвечающей более сильному полю. Что касается Фурье-спектров на панелях (c), (d) рис.2.16, то они показывают пики не только на частоте периодического поля $\omega/\omega_0=1$, но и в широком интервале частот $\omega/\omega_0>1$, причём в более сильном поле на рис.2.1(d) заполнены целые полосы частот. В соответствии с концепциями квантового хаоса [119], [215] такая структура Фурье-спектров говорит о проявлении хаотической динамики.



Рисунок 2.16. (а),(b) Зависимость от времени, измеряемом числом периодов *N* электрического поля, для среднего квадратичного уклонения $\Delta L(t)$ числа состояний *L*. (а) Амплитуда электрического поля \mathcal{E} =0.14 В/см, число f_{ε} =2.3, (b) \mathcal{E} =0.70 В/см и f_{ε} =11.5. (c), (d) Квадраты амплитуд Фурье-спектра $I_{\sigma_z}(\omega) = |\sigma_z(\omega)|$ для эволюции спиновой проекции $\sigma_z(t)$ [145].

Нас интересует совместное поведение плотности вероятности $\rho(x,y,t)$ и спиновой проекции $S_i(x,y,t)$, которые мы будем рассматривать в моменты времени t=NT, вычисляя для состояния (2.40) как

$$\rho(x,y,t) = \psi^{+}(x,y,t) \cdot \psi^{+}(x,y,t), \qquad (2.43)$$

$$S_i(x,y,t) = \psi^+(x,y,t) \cdot \sigma_i \psi^+(x,y,t).$$
 (2.44)

На рис.2.17(а), (d) показаны распределение (2.43) и *z*-компонента спиновой плотности (2.44) в области КТ для начального состояния с номером *n*₀=200. На

панелях (c)-(f) показаны они же после N=500 периодов электрического поля для двух значений его амплитуды, таких же, как на рис.2.16: $\mathcal{E}=0.14$ В/см (панели (b), (e) рис.2.17) и $\mathcal{E}=0.70$ В/см (панели (c), (f) рис.2.17).



Рисунок 2.17. (a), (d) распределения плотности вероятности (2.43) и *z*-компоненты спиновой плотности (2.44) в области КТ для начального состояния n_0 =200. На панелях (c)-(f) показаны они же после *N*=500 периодов электрического поля двух значений его амплитуды: (b), (e) \mathcal{E} =0.14 В/см; (c), (f) \mathcal{E} =0.70 В/см. Наблюдается переход к стохастической пространственной картине для обоих распределений [145].

Сравнивая панели (a), (d) для начального состояния с остальными панелями на рис.2.17, можно сделать вывод, что с течением времени наблюдается переход к стохастической пространственной картине для обоих распределений (2.43), (2.44). Поэтому представляет интерес расчёт влияния силы СОВ на статистические параметры эволюции, в частности, на пространственный коррелятор величин

(2.43) и (2.44), определяемый следующим образом. Если две величины ρ , S_z измеряются в некотором числе точек $i=1,...,N_d$ плоскости внутри КТ, на котором показаны их распределения на рис.2.17, то их коэффициент корреляции r_{ρ,S_z} есть [9]

$$r_{\rho,S_{z}}(t) = \frac{K_{\rho,S_{z}}(t)}{\Delta\rho(t) \cdot \Delta S_{z}(t)}, \quad K_{\rho,S_{z}}(t) = \sum_{i=1}^{N_{d}} \left(\frac{\rho(i,t)S_{z}(i,t)}{N_{d}}\right) - \overline{\rho}(t)\overline{S}_{z}(t), \quad (2.45)$$

где $\Delta \rho$ и ΔS_z есть соответствующие средние квадратичные отклонения, а $\overline{\rho}$ и S_z есть средние значения, вычисленные по точкам *i* в области КТ. На рис.2.18 приведены графики для $r_{\rho,S_z}(t)$ при фиксированной амплитуде поля $\mathcal{E}=0.14$ В/см для трёх значениях параметра Рашбы: $\alpha_R=0.5$ мэВ·нм (сплошная чёрная кривая), $\alpha_R=1.5$ мэВ·нм (пунктирная красная кривая) и $\alpha_R=5$ мэВ·нм (точечно-пунктирная синяя кривая).



Рисунок 2.18. Зависимость от времени коррелятора $r_{\rho,S_z}(t)$ из (2.45) при фиксированной амплитуде поля $\mathcal{E}=0.14$ В/см для $\alpha_R=0.5$ мэВ·нм (сплошная чёрная кривая), $\alpha_R=1.5$ мэВ·нм (пунктирная красная кривая) и $\alpha_R=5$ мэВ·нм (точечно-пунктирная синяя кривая). С ростом α_R от 0.5 мэВ·нм до 1.5 мэВ·нм коррелятор уменьшается при всех моментах времени [145].

На рис.2.18 видно, что даже для слабого СОВ $\alpha_R=0.5$ мэВ·нм (сплошная чёрная кривая) коррелятор (2.45) достаточно быстро спадает со временем, опускаясь ниже 0.3 за 25-30 периодов электрического поля. Для более сильного СОВ этот коррелятор с самого начала динамики остаётся низким, менее 0.2. Таким образом,

сильное СОВ обеспечивает расцепление корреляций плотности вероятности (2.43) и спиновой плотности (2.44) с самого начала динамики и в умеренном электрическом поле. В этом состоит парадоксальное на первый взгляд отличия влияние СОВ от системы с простым спектром или с небольшим числом уровней, где нет хаотической динамики. В такой системе СОВ, наоборот, связывает эволюцию координаты и спина. В системе же с большим числом уровней, демонстрирующей хотя бы кратковременный переход к хаотическому режиму в переменном поле (см. рис.2.16, 2.17), сильное СОВ способствует расцеплению корреляций для плотностей (2.43) и (2.44), демонстрируя свою роль в хаотическом характере начального этапа динамики.

2.5. Динамика в двойной КТ под действием импульса специальной формы 2.5.1. Методы квантовой теории оптимального управления (QOCT)

Простая монохроматическая форма (2.24) для зависимости электрического поля от времени удобна с технической точки зрения, но не всегда обеспечивает достаточно быстрый переворот спина в многоуровневой системе, как мы видели в параграфе 2.3. Поэтому представляет интерес задача оптимизации формы сигнала F(t) с целью наискорейшего достижения финального состояния, которое может состоять в смене знака проекции спина, смене области локализации волновой функции из одной КТ в другой, либо их комбинации. Такая задача решалась в работе [64], где для подбора зависимости F(t) электрического поля от времени в нашей модели двойной КТ работавшими с нами испанскими коллегами применялись методы квантовой теории оптимального управления (QOCT) [260], [222], [62], [73], [65]. Пусть задача состоит в переходе за время *T* из данного начального состояния ψ_i :

$$\psi_i \to \psi_t. \tag{2.46}$$

Этот переход осуществляется под действием электрического поля F(t) с искомым профилем, который параметризуется некоторым набором величин

$$\vec{u} = (u_1, \dots, u_M),$$
 (2.47)

т.е. $F = F(\vec{u},t)$. Различный набор коэффициентов (2.47) приводит к различной форме итоговой волновой функции $\Psi(\vec{u},T)$ в конце времени эволюции *T*. В рамках QOCT для нашей задачи набор параметров $\vec{u} = (u_1, ..., u_M)$ сводится к коэффициентам Фурье-спектра электрического поля F(t). Его поиск приводит к нахождению максимума функционала [64]

$$G[\vec{u}] = \left| \left\langle \psi_t \left| \Psi(\vec{u}, T) \right\rangle \right|^2 - \gamma \int_0^T F^2(\vec{u}, t) dt, \qquad (2.48)$$

где постоянная $\gamma>0$ необходима для обеспечения одинаковой размерности двух слагаемых в (2.48). Первое слагаемое в правой части (2.48) показывает, насколько близко текущий, зависящий от набора (2.47) вид волновой функции $\Psi(\vec{u},T)$ близок к целевой функции ψ_t конечного состояния. Второе слагаемое по модулю имеет смысл полной энергии, переданной электрическим полем за время *T*, которую желательно минимизировать, поэтому перед этим слагаемым стоит знак «минус». Таким образом, наиболее близкая к конечному состоянию функция $\Psi(\vec{u},T)$ с наименьшей полной энергией поля за время его действия будет доставлять максимум функционала (2.48) при некотором оптимальном наборе параметров (2.47). Далее задача сводится к проблеме оптимизации с поиском критических точек в многомерном пространстве параметров (2.47).

2.5.2. Результаты QOCT для динамики в двойной КТ

Рассмотрим примеры применения QOCT с функционалом (2.48) для рассмотренной в параграфах 2.2 и 2.3 задачи об одномерной двойной КТ со СОВ в постоянном магнитном поле и переменном электрическом поле. Все параметры и схема энергетических уровней остаются теми же, что на рис.2.10. В качестве первого примера рассмотрим задачу о переходе между двумя нижними состояниями $\psi_0 \rightarrow \psi_1$ с противоположным спином в поле $B_z=1.73$ Т, уровни энергии которых показаны в левой части рис.2.10. С использованием методов QOCT оказывается возможным так подобрать коэффициенты (2.47), определяющие Фурье-спектр электрического поля, что переворот спина, как

показывает рис.2.19, происходит не на 100-150 зеемановских периодах (2.23), как это было на рис.2.14(a), а уже на одном периоде поля $T_{Z}^{(A)} \approx 115$ пс, т.е. частота переворота увеличивается на два порядка. При этом форма импульса поля F(t) и его спектр, показанные на рис.2.19(а), оказываются достаточно сложными. Для сравнения с оптимальным импульсом, показанным сплошной линией на рис.2.19(а), штрихпунктирной линией показана исходная синусоидальная форма импульса. Спектр импульса показан на вставке к панели (а). Зависимость заселённости нижних четырёх состояний (см. левую часть рис.2.10) от времени показана на рис.2.19(b). Начальное состояние с вероятностью $P_0(0)=1$ в конце импульса переходит в состояние с $P_1(T) \approx 0.999$, т.е. наблюдается практически полный переход между начальным и целевым состоянием. На рис.2.19(с) показана эволюция распределения плотности вероятности во времени, где светлые участки отвечают максимумам, а среднее значение $\langle x \rangle / d$ показано чёрной кривой. Видно, что во время действия импульса электрон может в промежуточные моменты времени локализоваться в каждой из КТ, т.е. эволюция спина сопровождается туннелированием. Наконец, на панели (d) рис.2.19 показана динамика вектора, компоненты которого есть средние значения спина,

$$\vec{S}(t) = (S_x(t), S_y(t), S_z(t)),$$
 (2.49)

а показанная сфера единичного радиуса называется сферой Блоха. Поскольку в присутствии СОВ значение спиновой проекции не является хорошим квантовым числом, вектор (2.49) движется не только по поверхности, но и внутри сферы Блоха.



Рисунок 2.19. (а) Форма оптимального импульса поля F(t) и его спектр (на вставке), обеспечивающие переворот спина на одном периоде (2.23). Штрихпунктирной линией показана синусоидальная форма импульса. (b) Зависимость заселённости нижних четырёх состояний (см. левую часть рис.2.10) от времени. Начальное состояние с $P_0(0)=1$ в конце импульса переходит в состояние с $P_1(T)\approx 0.999$. (c) Эволюция распределения плотности вероятности во времени. (d) Динамика спинового вектора (2.49) на сфере Блоха, показывающая переворот спина на интервале 0 < t < T [64].

На рис.2.19(d) можно видеть, что к концу времени действия импульса t=T спиновый вектор (2.49) меняет своё направление с северного полюса сферы на южный. Таким образом, с помощью подбора формы импульса в рамках QOCT возможен переворот спина уже на одном зеемановском периоде (2.23).

Для магнитного поля $B_z=6.93$ T, структура уровней в котором показана в правой части рис.2.10, переворот спина означает переход $\psi_0 \rightarrow \psi_2$ между первым и третьим уровнями. Поскольку расстояние между ними больше, чем в предыдущем примере, можно ожидать более высокочастотной эволюции. Форма и результат воздействия оптимального импульса показаны на рис.2.20 (a) и (b) - (d), соответственно, по той же схеме, что и на рис.2.19. Можно видеть, что форма и спектр оптимального импульса на панели (а) являются более сложными, чем на рис.2.19(а), а длительность импульса в единицах зеемановского периода $T_{Z'}^{(A)}$ оказывается большей, до $3T_Z^{(A)} \approx 66$ пс. В абсолютных единицах времени импульс на рис.2.20(а) всё равно короче, чем на рис.2.19(а), т.к. расщепление уровней с разной проекцией спина с учётом СОВ на рис.2.20 больше в пять раз. На панели (b) рис.2.20 можно видеть, что в начальной фазе импульса происходят осцилляции в основном между состояниями ψ_0 и ψ_1 с одинаковой по знаку проекцией спина, и лишь в конце импульса происходят интенсивные осцилляции между состояниями ψ_2 и ψ_4 с противоположной проекцией спина, которые заканчиваются выходом на заселённость $P_2(T)$ состояния ψ_2 , близкую к единице. На панели (с) рис.2.20 показана эволюция плотности вероятности в области двойной КТ, на которой вновь видны локальные максимумы в одной КТ, т.е. интенсивная эволюция спина сопровождается туннелированием. Наконец, на панели (d) рис.2.20 показана эволюция спинового вектора (2.49) на сфере Блоха. Видно, что после нескольких вращений вокруг вектора магнитного поля, с которым совпадает полярная ось, направление спинового вектора приходит из северного полюса в южный.



Рисунок 2.20. То же, что на рис.2.19, для динамики в магнитном поле B_z =6.93 T, где переворот спина достигается на трёх периодах $T_{Z'}^{(A)}$ [64].

В рамках QOCT возможна реализация эволюции между состояниями с различной ориентацией как спина, так и пространственной локализацией. Пусть начальное состояние в поле $B_z=1.73$ Т локализовано в левой КТ и имеет положительную проекцию спина S_z , а конечное состояние мы хотим видеть в

правой КТ с противоположным вектором спина (2.49). Начальное состояние может быть построена как комбинация функций $\psi_i = (\psi_0 - i \psi_2) / \sqrt{2}$ для схемы уровней в левой части рис.2.10. Конечное же состояние может быть построено как $\psi_t = (\psi_1 - i\psi_3)/\sqrt{2}$. Соответствующее типичное время перехода $T_t^{(A)+(B)}$ может быть оценено как $T_t^{(A)+(B)} = 2\pi\hbar/\Delta E_{AB} \approx 116$ пс, где из структуры уровней в правой части рис.2.10 мы получаем $\Delta E_{AB} = (\Delta_Z^{(A)} + \Delta_Z^{(B)})/2$, где $\Delta_Z^{(A,B)}$ обозначает зеемановское расщепление между состояниями ψ_0 , ψ_2 и ψ_1 , ψ_3 , соответственно. Результаты для формы оптимального импульса и ходе эволюции показаны на рис.2.21 (a) и (b)-(d) по той же схеме, что на рис.2.19 и рис.2.20. На панели (d) рис.2.21 можно видеть, что переворот спина достигается в конце периода времени $T_t^{(A)+(B)}$, а туннелирование из одной КТ в другую происходит быстрее, как это видно на панели (c): за время $T_t^{(A)+(B)}$ электрон успевает совершить три полных осцилляции между двумя КТ, пока в середине четвёртой осцилляции он не финиширует в правой КТ. Середина эволюции, как это видно из сравнения панелей (c) и (d) на рис.2.21, является также интервалом, на котором происходит основная часть переворота спина в смысле сены знака проекции S_z. Это является ещё одним примером эффективности спиновой динамики, которая стимулируется интенсивной орбитальной динамикой с туннелированием между КТ в присутствии СОВ.

Подводя итог эволюции с быстрым переворотом спина под действием импульса, подобранного в рамках QOCT, можно сказать, что за высокую эффективность, заключающуюся в быстроте переворота спина, приходится платить достаточно сложной формой оптимального импульса с нетривиальной формой спектра, как это видно на вставках к панелям (а) на рис.2.19-2.21. Современные микроволновые источники, используемые в экспериментах с двойными КТ в полупроводниковых структурах [60], [250], [204], [187], характеризуются сравнительно небольшим числом «окон» по частоте с эффективным пропусканием излучения, поэтому формирование оптимальных импульсов рассмотренного в этом параграфе вида является достаточно сложной технической проблемой.



Рисунок 2.21. То же, что на рис.2.19 и рис.2.20, для динамики в магнитном поле B_z =1.73 T, когда начальное состояние $\psi_i = (\psi_0 - i\psi_2)/\sqrt{2}$ локализовано в левой КТ со спином вверх, а конечное состояние $\psi_t = (\psi_1 - i\psi_3)/\sqrt{2}$ локализовано в правой КТ и имеет противоположное направление спинового вектора (2.49) [64].

2.6. Эволюция под действием периодического поля в одиночной КТ в нанопроволоке с учётом состояний континуума

До сих пор мы рассматривали структуры с состояниями дискретного спектра и ограниченными в пространстве волновыми функциями. Между тем, наряду с дискретным спектром в ряде задач важную роль играют и состояния континуума. Взаимодействие с ними необходимо учитывать, если потенциальная яма не слишком глубокая по сравнению с амплитудой внешнего поля, что приводит к необходимости учёта взаимодействия с состояниями континуума. При учёте спиновой степени свободы в магнитном поле и в присутствии СОВ вопрос о взаимодействии локализованных и делокализованных состояний приобретает особый интерес, в частности, при объяснении роли СОВ в этом взаимодействии. Экспериментально подобные эффекты важны в структурах с донорными атомами, которые были исследованы для GaAs, InP, CdTe [177], а также для мелких донорных состояний (shallow donors) в ZnO [178]. Последний пример наиболее интересен ДЛЯ нас, поскольку В потенциале мелких доноров может образовываться всего один дискретный уровень, который в присутствии магнитного поля расщепляется в зеемановский дублет, изолированный от остальных состояний. Такая система, следовательно, может служить моделью для создания кубита. В этом параграфе мы вначале рассмотрим модель динамики для мелкого донорного состояния в нанопроволоке на основе InSb с единственным дискретным уровнем, а далее мы рассмотрим случай более глубокой ямы с несколькими дискретными уровнями.

2.6.1. Состояния дискретного и непрерывного спектра для мелкого донора в нанопроволоке в магнитном поле с учётом СОВ

Рассмотрим структуру на основе нанопроволоки, показанную на рис.2.22(а), в которой имеется мелкая потенциальная яма в потенциале донора U(x) с одним дискретным уровнем E_0 и волновой функцией φ_0 , плотность вероятности для которой также показана на рис.2.22(а) [148]. На структуру наложено постоянное магнитное поле с индукцией *B*, вдоль которого мы направим ось *Oz*, а вдоль нанопроволоки будет действовать периодическое электрическое поле с амплитудой $F(t)=e\mathcal{E}(t)$, как это показано там же на рис.2.22(a). Схема энергетического спектра такой системы изображена ниже на рис.2.22(b). В присутствии магнитного поля дискретный уровень E_0 расщепляется зеемановским слагаемым в гамильтониане на уровни $E_{1,2}$ с противоположной проекцией спина на направление магнитного поля, показанной стрелками на рис.2.22(b). Мы будем учитывать также состояния непрерывного спектра, схематично показанные полосами голубого и красного цвета и также имеющие противоположную проекцию спина.



Рисунок 2.22. (а) Нанопроволока с одним дискретным уровнем E_0 и волновой функцией φ_0 , для состояния в потенциале U(x) мелкого донора. Присутствует перпендикулярное магнитное поле с индукцией *B*, вдоль нанопроволоки действует периодическое электрическое поле с амплитудой $F(t)=e\mathcal{E}(t)$. (b) Схема энергетического спектра: уровень E_0 расщепляется на уровни $E_{1,2}$ с противоположной проекцией спина, как и состояния непрерывного спектра, показанные полосами голубого и красного цвета [148].

Мы предполагаем, что энергии двух расщеплённых по спину уровней в нанопроволоке принадлежат нижней зоне размерного квантования в поперечном направлении, поэтому движение эффективно одномерное с $p \equiv p_x$. Гамильтониан электрона в приближении эффективной массы в потенциале донора без магнитного поля и СОВ имеет вид

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{U_0}{\cosh^2(x/d)},$$
 (2.50)

где U_0 и *d* есть глубина и эффективная ширина потенциальной ямы, созданной донором в нанопроволоке. Случай мелкого донора отвечает неравенству $U_0 <<\hbar^2/md^2$, когда энергия единственного дискретного уровня может быть оценена как $E_0 \approx -m(U_0 d)^2/\hbar^2$. Волновая функция этого состояния на больших расстояниях от центра ямы при |x| >> d может быть аппроксимирована экспонентой [27],

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{l}} \exp\left(-\frac{|x|}{l}\right), \qquad (2.51)$$

где длина локализации $l = \sqrt{\hbar^2 / 2m |E_0|} >> d$, т.е. волновая функция распространяется на значительное расстояние за область потенциальной ямы, как это схематически показано на рис.2.22(а). В присутствии перпендикулярного магнитного поля $\vec{B} = (0,0,B)$, задающего зеемановское расщепление $\Delta_Z = g\mu_B B$, и СОВ Рашбы $H_R = \alpha_R \sigma_y p / \hbar$ гамильтониан приобретает вид

$$H_1 = H_0 + \frac{\Delta_Z}{2}\sigma_z + \frac{\alpha_R}{\hbar}\sigma_y p. \qquad (2.52)$$

Наличие или отсутствие слагаемого Дрессельхауза в СОВ в (2.52) зависит от кристаллографической ориентации образца с нанопроволокой. Вспомним, что этот вклад в объёмном полупроводнике можно записать как $H_D = \beta_D(\vec{\kappa}, \vec{\sigma})$, где *x*-компонента вектора $\vec{\kappa}$ есть $\kappa_x = k_x (k_y^2 - k_z^2)$, а остальные компоненты получаются циклической перестановкой индексов [261], [15]. Это означает, что для нанопроволоки, выращенной вдоль кристаллографического направления (1, 0, 0),
вклад Дрессельхауза в нанопроволоке будет иметь вид $H_D^{[x]} = \beta_D k_x \sigma_x (\langle k_y^2 \rangle - \langle k_z^2 \rangle)$, где средние значения $\langle k_i^2 \rangle$ определяются профилем поперечного сечения конкретного образца. Структура $H_D^{[x]}$ говорит о том, что при $\langle k_y^2 \rangle = \langle k_z^2 \rangle$ этот вклад обратится в нуль, что мы и будем предполагать в этом параграфе, оставляя лишь вклад Рашбы в СОВ. Если нанопроволока ориентирована в другом направлении, то вклад Дрессельхауза лишь изменит направление эффективного магнитного поля от СОВ, оставляя прежнюю линейную зависимость от компоненты квазиимпульса, что качественно не изменит характер эволюции.

Периодическое электрическое поле описывается потенциалом

$$V(x, t) = e\mathcal{E}_0 x \sin \omega t, \qquad (2.53)$$

где частота выбирается из условия спинового резонанса $\hbar \omega = \Delta_Z$. По мере роста магнитного поля в (2.52) верхнее из дискретных состояний на рис.2.22(а) приближается к нижнему краю состояний континуума, который достигается в поле B_m , определяемом из условия

$$\mu_B | g | B_m = | E_0 |. \tag{2.54}$$

Мы будем рассматривать магнитные поля в интервале $B < B_m$, чтобы избежать прямого смешивания состояний дискретного и непрерывного спектров. В присутствии СОВ и периодического электрического поля, однако, их взаимодействие будет иметь место динамическим образом.

В качестве модели непрерывного спектра для численных расчётов мы выберем дискретное приближение, когда делокализованные на бесконечной одномерной области вдоль *Ox* волновые функции заменяются локализованными функциями вида

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin \frac{\pi n x}{L}, \quad n=1,2,...$$
 (2.55)

обращающимися в нуль при $x = \pm L$ на очень далёких стенках L >> l. Соответствующие энергии есть $E_n = \pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$. В численных расчётах мы полагаем параметр

$$N = L/l \sim 10^2, \tag{2.56}$$

который приблизительно описывает число состояний с энергиями E_n в модели непрерывного спектра на интервале энергий дискретного спектра $|E_0|$. Для рассматриваемых примеров эволюции такая модель непрерывного спектра является адекватной, и дальнейшее увеличение числа N из (2.56) к качественно новым особенностям не приводит.

В присутствии магнитного поля и СОВ в гамильтониане (2.52) собственные функции $\psi_s(x)$ дискретной и непрерывной части спектра представляют собой двухкомпонентные спиноры. Мы находим их в виде разложения по комбинации локализованной функции (2.51) и делокализованных функций (2.55) вида

$$\psi_s(x) = \sum_n \begin{pmatrix} a_n^s \\ b_n^s \end{pmatrix} \varphi_n(x), \qquad (2.57)$$

где в сумму включены и локализованное, и делокализованные состояния. В присутствии СОВ состояния двух расщеплённых по спину уровней дискретного спектра $E_0^{(1,2)} = E_0 \pm \Delta_Z/2$ на рис.2.22(b) приобретают примесь состояний непрерывного спектра с энергиями $E_n^{(1,2)} = E_n \pm \Delta_Z/2$. В первом порядке теории возмущений по вкладу от СОВ их волновые функции можно представить как

$$\psi_{1} = A_{1} \begin{pmatrix} \varphi_{0}(x) \\ \sum_{n} a_{n}^{(1)} \varphi_{n}(x) \end{pmatrix}, \qquad \psi_{2} = A_{2} \begin{pmatrix} \sum_{n} a_{n}^{(2)} \varphi_{n}(x) \\ \varphi_{0}(x) \end{pmatrix}, \qquad (2.58)$$

где $A_{1,2}$ есть нормировочные постоянные, а для коэффициентов $a_n^{(1,2)}$ по теории возмущений мы получаем, что

$$a_n^{(1,2)} = \mp \frac{\alpha_R}{E_0^{(1,2)} - E_n^{(1,2)}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} dx,$$
(2.59)

где для функций (2.51), (2.55) мы получаем значение интеграла в (2.59)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \frac{d\varphi_0(x)}{dx} dx = -\frac{2}{\sqrt{lL}} \frac{\pi n l / L}{1 + (\pi n l / L)^2}.$$
(2.60)

Из (2.59) видно, что вклад во вторую, неосновную компоненту спинора пропорционален амплитуде СОВ α_R . Выражения (2.58) и (2.59) помогают оценить

также величину матричного элемента $x_{1,2}$ от оператора координаты между возмущёнными состояниями дискретного спектра (2.58). Она необходима для выяснения роли СОВ в переходах между этими уровнями в режиме ЭДСР. Значение матричного элемента $x_{1,2}$ оператора x на состояниях (2.58) определяется выражением

$$x_{12} = \sum_{n} \left(a_n^{(1)} + a_n^{(2)} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) x \varphi_0(x) dx, \qquad (2.61)$$

откуда после подстановки функций (2.51), (2.55) вместе с (2.59), (2.60) мы получаем, что

$$x_{1,2} = \frac{\alpha_R}{|E_0|} \frac{1}{\xi^3} \Big(\xi^2 + 4 \Big(\sqrt{1 - \xi} + \sqrt{1 + \xi} - 2 \Big) \Big), \tag{2.62}$$

где параметр

$$\xi = \frac{\Delta_Z}{|E_0|} = \frac{B}{B_m}.$$
(2.63)

В пределе слабого магнитного поля при ξ<<1 из (2.62) следует, что

$$x_{1,2} \approx -\frac{5\alpha_R \xi}{16|E_0|},$$
(2.64)

что вместе с (2.62) говорит о том, что связь между дискретными уровнями $E_0^{(1,2)}$ с разной проекцией спина пропорциональная амплитуде СОВ. Матричный элемент (2.62) также можно оценить в терминах длины спиновой прецессии (1.12) как $x_{1,2} \sim l^2/L_{SO}$. Отметим, что выражение (2.61) с коэффициентами $a_n^{(1,2)}$, определяющими вклад состояний непрерывного спектра, ясно показывает их роль и роль СОВ для описания переходов между состояниями дискретного спектра в присутствии СОВ.

В присутствии периодического электрического поля с потенциалом (2.53) мы решаем нестационарное уравнение Шрёдингера по стандартной схеме, которая описывалась в параграфах 2.2-2.4. Волновая функция строится в виде разложения

$$\Psi(x,t) = \sum_{s} C_s(t) \psi_s(x)$$
(2.65)

по собственным функциям (2.57) гамильтониана (2.52). Поскольку электрическое поле является периодическим, используются методы теории Флоке, как в параграфах 2.3, 2.4. Численные результаты для эволюции начального состояния на уровне E_1 со спином вверх на рис.2.22(а) описываются в следующем пункте.

2.6.2. Результаты расчёта динамики в периодическом поле с учётом состояний континуума

Мы рассмотрим состояния в нанопроволоке на основе InSb с эффективной массой электрона $m=0.0136 m_0$ и g-фактором g=-50.6 [226]. Амплитуда α_R СОВ Рашбы в InSb может варьироваться в зависимости от поля затвора, достигая 100 мэВ·нм [171], [262]. Параметры потенциала мелкого донора в (2.50) мы выбираем следующие: амплитуда U₀=1.5 мэВ, размер ямы d=10 нм, что отвечает параметрам донора с учётом экранировки (Ando 1982, Андо 1985). Для энергии единственного дискретного уровня в яме мы получаем значение $E_0 = -0.072$ мэВ, что отвечает длине локализации в (2.51) *l*≈200 нм. Максимальное магнитное поле из (2.54) есть B_m =25 мТ. Мы будем рассматривать поля B=0.25 B_m , 0.5 B_m и 0.75 B_m , выбирая для каждого из них два значения параметра α_R. Первое из них α_R=6 мэВ·нм отвечает сравнительно слабому СОВ с длиной спиновой прецессии $L_{SO} \sim \hbar^2 / m \alpha_R \approx 10^3 nm > l$, второе значение $\alpha_R = 25$ мэВ·нм отвечает сильному СОВ с длиной L_{SO}~l. Количество функций в модели непрерывного спектра, равное smax~500, обеспечивает устойчивость и адекватность результатов, не меняющихся при дальнейшем росте s_{max}. Условие, при котором амплитуду электрического поля в (2.53) можно считать сильным на интервале локализации *l*, записывается в виде $e\mathcal{E}_m l \sim |E_0|$, откуда $\mathcal{E}_m \sim 5$ В/см. Мы будем рассматривать поля слабее \mathcal{E}_m , чтобы не уходить в область процессов с нелинейной ионизацией. Действительно, согласно теории ионизации [12], [13] вероятность ионизации за время $\tau_0 = \hbar / |E_0|$ в поле \mathcal{E}_0 можно оценить как

$$P \sim \exp(-4 \mathcal{E}_m/3\mathcal{E}_0), \qquad (2.66)$$

что позволяет оценить время ионизации как

$$\tau_i \sim \tau_0 \exp(4 \ \mathcal{E}_m/3\mathcal{E}_0). \tag{2.67}$$

Поскольку рассматриваемые нами амплитуды поля $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E}_m$, время ионизации (2.67) существенно превосходит время $\tau_0 \sim T/2$, т.е. система не подвержена ионизации на большом интервале времени в единицах периода поля *T*.

Мы будем рассматривать временную зависимость для средних значений координаты (2.25) и спина (2.26), как это уже делалось в параграфе 2.3. Начнём со значения магнитного поля $B=0.5B_m$, и амплитуды СОВ $\alpha_R=6$ мэВ·нм. Для этих параметров расщепление E_2 - E_1 уровней дискретного спектра составляет 0.035 мэВ, чему соответствует частота электрического поля 2π х 8.65 ГГц. На рис.2.23 показаны результаты для $\sigma_z(t)$ и x(t) в дискретные моменты времени в единицах периода поля T для двух значений амплитуды поля $\mathcal{E}_0=0.5$ и 1.5 В/см, первой из которых отвечают сплошные чёрные кривые, а второй – пунктирные синие кривые. Для меньшей амплитуды поля динамика координаты и спина достаточно регулярная. Проекция спина на панели (а) испытывает осцилляции с частотой, близкой к классической частоте Раби $\Omega_R = |x_{12}| F/\hbar$, где $F = e\mathcal{E}_0$. Чёрный кружок показывает отметку времени $t=T_f/2$, где T_f есть время переворота спина в поле $\mathcal{E}_0 = 0.5$ В/см. Динамика среднего значения координаты на панели (b) показывает, что в слабом поле значение $|x(t)| \sim 40...80$ нм, т.е. выполняется неравенство |x(t)| < l. Эти результаты означают, что в слабом периодическом поле влияние делокализованных состояний континуума на эволюцию координаты и спина минимально.

В более сильном поле $\mathcal{E}_0=1.5$ В/см картина эволюции с синими пунктирными кривыми на рис.2.23 выглядит иначе. Именно, как проекция спина, так и координата показывают достаточно сложную динамику, в которой участвует большое число состояний континуума. Спиновая проекция $\sigma_z(t)$ меняется на синей кривой на панели (а) в меньших пределах, чем на чёрной кривой, в то время как координата на панели (b), наоборот, меняется в более широких пределах, которые даже превосходят длину локализации $l\sim200$ нм.



Рисунок 2.23. Эволюция средних значений (a) $\sigma_z(t)$ и (b) x(t) в дискретные моменты времени в единицах периода поля *T* для двух значений амплитуды поля $\mathcal{E}_0=0.5$ и 1.5 В/см, первой из которых отвечают сплошные чёрные кривые, а второй – пунктирные синие кривые [148].

Таким образом, даже в умеренных полях ~0.3 \mathcal{E}_m влияние состояний континуума на динамику координаты и спина является существенным, причём эффективность переворота спина с ростом доли состояний непрерывного спектра снижается. Последнее наблюдение можно объяснить примерно равным вкладом состояний континуума с противоположным спином, которые участвуют в эволюции в каждый момент времени. В результате среднее значение $\sigma_z(t)$ меняется в менее широких пределах, чем при вкладе только от двух состояний дискретного спектра, зависимость вклада которых от времени сдвинута друг от друга по фазе.

Обратимся к анализу результатов моделирования динамики при различных значениях амплитуды электрического поля \mathcal{E}_0 . Нашей целью будет фиксация максимально достижимой амплитуды координаты x_{max} и обратного времени переворота спина T/T_f за время наблюдения 200 *T*. На рис.2.24 показаны

150

результаты в магнитном поле $B=0.5 B_m$ для двух значений амплитуды СОВ: $\alpha_R=6$ мэВ·нм (чёрная сплошная кривая) и $\alpha_R=25$ мэВ·нм (красная пунктирная кривая). Аналогичные рисунки для T/T_f в магнитном поле $B=0.25 B_m$ и $B=0.75 B_m$ показаны на рис.2.25(а) и (b) соответственно. Из рис.2.24 можно сделать вывод, что с ростом амплитуды электрического поля \mathcal{E}_0 как скорость переворота спина T/T_f , так и особенно максимальное значение амплитуды координаты x_{max} быстро растут, хотя обе функции являются немонотонными. Рост x_{max} на порядок при возрастании \mathcal{E}_0 от 0.5 до 2.5 В/см говорит о растущем вкладе состояний континуума, причём для большей амплитуды СОВ этот рост ещё выше. Таким образом, СОВ влияет не только на спиновую, но и на пространственную динамику.



Рисунок 2.24. (а) Обратное времени переворота спина T/T_f и (b) максимально достижимая амплитуда координаты x_{max} и как функция амплитуды электрического поля \mathcal{E}_0 в магнитном поле $B=0.5~B_m$ для двух значений амплитуды СОВ: $\alpha_R=6$ мэВ·нм (чёрная кривая) и $\alpha_R=25$ мэВ·нм (красная кривая) [148].



Рисунок 2.25. То же, что на рис.2.24(а) для скорости переворота спина в магнитном поле (а) *B*=0.25 *B_m* и (b) *B*=0.75 *B_m* [148].

Что касается зависимости скорости переворота спина T/T_f от \mathcal{E}_0 на рис.2.24 и рис.2.25 при различных значениях магнитного поля, нелинейность этой зависимости была отмечена ещё в параграфе 2.3 при исследовании ЭДСР в системе с несколькими уровнями. Результаты на рис.2.24 и на рис.2.25 относятся к системе с моделью континуума, содержащей сотни состояний, поэтому нелинейный характер кривых понятен. Далее, на рис.2.24(а) и рис.2.25 есть значения \mathcal{E}_0 , для которых отмечена нулевая скорость переворота спина. Это соответствует эволюции, при которой $\sigma_z(t)$ никогда не достигает нулевого значения, т.е. переход к спиновой проекции другого знака не происходит. Что касается влияния амплитуды СОВ, то с ростом α_R скорость спина в среднем ожидаемо возрастает. Особенно это заметно на панели (b) рис.2.25 в самом сильном из рассмотренных магнитных полей $B=0.75 B_m$, когда расстояние между уровнями зеемановского дублета самое большое. Тем не менее, рост по α_R не является линейным и одинаковым для всех значений амплитуды электрического поля \mathcal{E}_0 . Это обстоятельство связан с участием в динамике большого числа состояний континуума с чередующейся проекцией спина.

Для большинства точек на рис.2.24(а) и рис.2.25 время переворота спина T_f не превосходит ~10 *T*. В рассмотренных примерах этого пункта значение *T*~0.1 пs, поэтому $T_f \sim 1$ пs. Время релаксации спина в слабом магнитном поле в рассматриваемых структурах превосходит этот масштаб на несколько порядков [135], [111]. Что касается влияния шумов, то типичный зарядовый шум с $1/f_-$ спектром не будет иметь пиков в области частот отвечающих частоте ЭДСР в нашей задаче [172]. Следовательно, можно говорить о когерентной манипуляции спином на рассмотренных временах порядка 100 *T*, что делает рассмотренную систему потенциально пригодной для создания кубита, в котором надо учитывать роль состояний континуума.

2.6.3. Динамика состояний в глубокой квантовой яме с несколькими уровнями с учётом континуума

Следующим шагом является рассмотрение структуры в нанопроволоке, подобной показанной на рис.2.22, но с более глубокой и широкой потенциальной ямой, в которой имеется несколько уровней дискретного спектра [149]. Мы продолжим работать с моделью одиночной КТ в нанопроволоке из предыдущих двух пунктов, но будем считать потенциальную яму более глубокой и широкой, имеющей несколько дискретных уровней. Физически такая система может быть реализована в нанопроволоке, но не в поле одиночного донора, как это было в предыдущем пункте, а с помощью дополнительного электрода затвора, к нанопроволоке. Профиль потенциала и приближение примыкающего эффективной массы будут приняты нами такими же, как в (2.50), но с большее высоким и широким барьером с $U_0=27$ мэВ и d=50 нм. В этом случае у гамильтониана (2.50) есть пять дискретных уровней $E_1^{(0)}, \ldots, E_5^{(0)}$ под барьером. Энергии двух нижних уровней определяют частота переходов и характерное время эволюции:

$$\omega_0 = (E_2^{(0)} - E_1^{(0)})/\hbar, \qquad T_0 = 2\pi/\omega_0.$$
(2.68)

Для выбранных параметров задачи мы получаем $\omega_0=13.43$ пс⁻¹ и $T_0=0.468$ пс, что определяет временную шкалу. Что касается волновых функций непрерывного спектра вида (2.55), мы используем значение длины нанопроволоки 2L=320d с 4000 базисными функциями (2.55), что обеспечивает хорошее приближение для описания континуума.

Мы выбираем значение магнитного поля в (2.52) В=0.447 Т, которому периодического отвечает частота поля В (2.53)при резонансе $\omega_d = \Delta_Z / \hbar = 2$ пс⁻¹, при этом линейная частота *f*=0.32 ТГц. Источники микроволнового поля на такой частоте отвечают уже суб-терагерцовому диапазону, который возникает в том числе в задачах с полупроводниковыми спиновыми кубитами [63] и прогресс в создании которых наблюдается в последние десятилетия [108], [242]. Как и в предыдущем пункте, будут выбираться два значение амплитуды СОВ Рашбы $\alpha_R=5$ мэВ·нм и $\alpha_R=25$ мэВ·нм. Начальное состояние вновь будет на нижем уровне, $\psi(x,0)=\varphi_1(x)$ со значением zпроекции спина $\sigma_z(t=0)\approx 1$. Амплитуда электрического поля $F=e\mathcal{E}_0$ в (2.53) будет определяться в мэВ/нм.

Мы начнём с примеров эволюции проекции спина $\sigma_z(t)$ при различных значениях α_R и при различных амплитудах *F* периодического поля. Результаты представлены на рис.2.26, где время отсчитывается в единицах T_0 , связанных с частотой переходов между двумя нижними орбитальными уровнями в КТ. Панель (а) отвечает $\alpha_R=5$ мэВ·нм, панель (b) отвечает $\alpha_R=25$ мэВ·нм. Кривые разного цвета соответствуют разным значениям амплитуды электрического поля *F*=0.16, 0.18, 0.20 и 0.22 мэВ/нм.



Рисунок 2.26. Эволюция проекции спина $\sigma_z(t)$ для (а) $\alpha_R=5$ мэВ·нм и (b) $\alpha_R=25$ мэВ·нм при различных значениях амплитуды электрического поля *F*=0.16, 0.18, 0.20 и 0.22 мэВ/нм. Время измеряется в единицах *T*₀ из (2.68). С ростом *F* амплитуда осцилляций спина уменьшается, что связано с растущей вероятностью ухода в состояния континуума [149].

Из рис.2.26 видно, что с ростом амплитуды электрического поля F амплитуда осцилляций спина уменьшается, что связано с растущей вероятностью ухода в состояния континуума. Как уже отмечалось в предыдущем пункте, состояния континуума поровну поделены на состояния со спином, параллельным и антипараллельным направлению магнитного поля, которые заполняют один и тот же интервал энергий. Таким образом, увеличение вклада состояний континуума приводит в среднем к уменьшению степени поляризации по спину, поскольку вклады от состояний континуума с различной проекцией спина компенсируют друг друга. Чем электрическое поле сильнее, тем этот процесс проявляется ярче, что и наблюдается на рис.2.26. Таким образом, в КТ с учётом состояний

континуума, которые присутствуют в большинстве реалистичных ситуаций, необходимо выбирать оптимальную амплитуду электрического поля для управления спином, чтобы избежать значимой «утечки» в состояния континуума, т.е. ионизации. Что касается скорости или характерного времени ионизации, аналитические её оценки и сравнение с численными расчётами будут представлены в следующем пункте.

Влияние СОВ на ионизацию можно проиллюстрировать следующим образом. Рассмотрим динамику среднего значения энергии

$$E(t) = \sum_{n} |C_{n}(t)|^{2} E_{n}, \qquad (2.69)$$

где в сумму дают вклад все базисные состояния из дискретной и непрерывной частей спектра с заселённостями $|C_n(t)|^2$ из разложения волновой функции (2.65). На рис.2.27 показаны примеры эволюции *E*(*t*) для (а) фиксированного СОВ $\alpha_R = 5$ мэВ·нм и различных амплитуд электрического поля F, а также (b) для фиксированного F=0.2 мэВ/нм и различных значений постоянной Рашбы $\alpha_R=0, 5$ и 25 мэВ·нм в области времён $t/T_0>100$. Вполне ожидаемо, что среднее значение энергии (2.69) имеет тенденцию к росту, поскольку внешнее электрическое поле увеличивает энергию системы. Время перехода E(t) через нуль, разделяющий состояния дискретного и непрерывного спектра, можно считать характерным временем ионизации. В поле выше 0.2 мэВ/нм электрон переходит в континуум примерно на 10 периодах электрического поля. Зависимость от амплитуды СОВ α_R на панели (b) рис.2.27 имеет менее тривиальный характер. Именно, кривые с $\alpha_R = 5$ и 25 мэВ·нм лежат ниже кривой с $\alpha_R = 0$. Такое замедление ионизации в присутствии СОВ можно объяснить более тесной связью состояний дискретного спектра с различной проекцией спина при наличии СОВ, благодаря чему электрон проводит в переходах между ними большее время, прежде чем перейти в состояния континуума. Следовательно, учёт СОВ важен для определения и времени ионизации в полупроводниковых структурах, где его вклад существенен.



Рисунок 2.27. Эволюции среднего значения энергии E(t) для (а) фиксированного СОВ α_R =5 мэВ·нм и различных амплитуд электрического поля F; (b) для фиксированного F=0.2 мэВ/нм и различных значений постоянной Рашбы α_R =0, 5 и 25 мэВ·нм в области времён t/T_0 >100 [149].

Ещё одним параметром, отражающим влияние СОВ на переворот спина при учёте состояний континуума, является эффективность переворота спина, которую по известной зависимости средних значений $\sigma_z(t)$ и E(t) мы определим как

$$\eta(t) = \frac{\Delta_Z}{2} \frac{\sigma_z(t) - \sigma_z(0)}{E(t) - E(0)},$$
(2.70)

которое представляет собой отношение двух энергий: в числителе стоит изменение энергии спиновой степени свободы, пропорциональное Δ_Z и связанная с переворотом спина, а в знаменателе стоит изменение средней энергии (2.69), связанное с перераспределением заселённостей дискретных уровней и состояний континуума. На рис.2.28(а), (b) показана зависимость $\eta(t)$ из (2.70) для α_R =5 и 25 мэВ·нм соответственно при нескольких значениях амплитуды электрического





Рисунок 2.28. Эволюции эффективность переворота спина $\eta(t)$ из (2.70) для (а) $\alpha_R=5$ мэВ·нм и (b) $\alpha_R=25$ мэВ·нм при нескольких значениях амплитуды электрического поля *F* [149].

Объяснение наблюдаемой зависимости $\eta(t)$ непосредственно следует из её определения (2.70). Именно, числитель дроби не может возрастать со временем, поскольку в фиксированном магнитном поле зеемановское расщепление фиксировано, а проекция спина ограничена. Знаменатель же в (2.70), как мы видим на рис.2.27, в среднем возрастает со временем, что приводит к постепенному уменьшению $\eta(t)$. Более интересна зависимость $\eta(t)$ от амплитуды поля *F* и от амплитуды СОВ α_R . Можно видеть, что наибольшей для обоих значений α_R эффективность $\eta(t)$ является для самой слабой амплитуды поля *F*=0.16 мэВ/нм. Это вновь связано с быстрым ростом средней энергии при возрастании *F*, который опережает изменение числителя в (2.70). Что касается

зависимости $\eta(t)$ от амплитуды СОВ α_R , можно видеть, что она растёт с ростом α_R , что объясняется возрастанием матричного элемента (2.62) с ростом α_R . Таким образом, из рис.2.28 следует, что для эффективного с энергетической точки зрения переворота спина нужна большая амплитуда СОВ и не слишком большая амплитуда электрического поля, рост которой приводит к ускорению перехода в континуум.

Вероятность локализации электрона в области КТ, определённая как сумма заселённостей локализованных состояний

$$P(t) = \sum_{i(\text{loc})} |C_i(t)|^2, \qquad (2.71)$$

также представляет интерес для визуализации в плане влияния на неё СОВ. На рис.2.29 показана вероятность локализации (2.71) (а) для двух значений α_R =5 мэВ·нм (пунктирные линии) и 25 мэВ·нм (сплошные линии) для различных амплитуд электрического поля *F*. Для сравнения на панели (b) на больших временах показана эволюция при α_R =0 (сплошные линии) и α_R =5 мэВ·нм (пунктирные линии). Из рис.2.29 можно сделать вывод, что если на малых временах (панель (а)) амплитуда СОВ не оказывает существенного влияния на вероятность (2.71), то на больших временах (панель (b)) рост амплитуды СОВ α_R в среднем приводит к увеличению времени пребывания в области КТ, т.е. к росту вероятности (2.71), в согласии с результатами на приведённом выше рис.2.27.



Рисунок 2.29. Эволюции вероятности локализации (2.71) (а) для двух значений α_R =5 мэВ·нм (пунктирные линии) и 25 мэВ·нм (сплошные линии) для различных амплитуд электрического поля *F*. (b) Эволюция при α_R =0 (сплошные линии) и α_R =5 мэВ·нм (пунктирные линии) [149].

Влияние СОВ на пространственное движение прослеживается в силу наличия спин-зависимого «аномального» вклада в скорость, который можно получить из (2.52):

$$v_{SO} = \frac{i}{\hbar} \left[\alpha_R \sigma_y k_x, x \right] = \frac{\alpha_R}{\hbar} \sigma_y, \qquad (2.72)$$

а также вклада в ускорение

$$\frac{d}{dt}v_{SO} = \frac{i}{\hbar}\frac{\Delta_Z}{2}\frac{\alpha_R}{\hbar}[\sigma_z,\sigma_y] = \frac{\alpha_R\Delta_Z}{\hbar^2}\sigma_x.$$
(2.73)

Из (2.72) и (2.73) видно, что спиновая динамика при наличии СОВ должна оказывать влияние на эволюцию координаты. На рис.2.30 показана эволюция среднего значения координаты x(t) для двух значений амплитуды электрического

поля, (a) F=0.16 мэВ/нм и (b) F=0.22 мэВ/нм. На каждой панели чёрная кривая отвечает отсутствию СОВ с $\alpha_R=0$, а красная кривая отвечает сильному СОВ с $\alpha_R=25$ мэВ·нм.



Рисунок 2.30. Эволюции среднего значения координаты x(t) для двух значений амплитуды электрического поля, (a) F=0.16 мэВ/нм и (b) F=0.22 мэВ/нм. На каждой панели чёрная кривая отвечает отсутствию СОВ с $\alpha_R=0$, а красная кривая отвечает сильному СОВ с $\alpha_R=25$ мэВ·нм [149].

На рис.2.30 можно видеть, что в слабом поле на панели (а) наличие СОВ сильно ограничивает движение электрона, амплитуда x(t) невелика. В сильном поле на панели (b) влияние СОВ не столь велико, т.к. амплитуда x(t) превышает размер ямы d=50 нм, хотя значения на рис.2.30(b) и меньше, чем классическое значение амплитуды колебаний в периодическом электрическом поле с амплитудой F и частотой ω_d ,

$$x_0^{[cl]} = \frac{F}{m\omega_d^2} \,. \tag{2.74}$$

Для F=0.22 мэВ/нм на панели (b) рис.2.30 мы получаем $x_0^{[cl]} \approx 720$ нм, что значительно превышает наблюдаемые на рисунке значения. Различие связано, очевидно, с квантовым характером эволюции, при котором при ионизации формируется достаточно широкое распределение плотности вероятности по всему пространству слева и справа от потенциальной ямы. Пример пространственной структуры волновой функции в конце эволюции при $t=655 T_0$ показан на рис.2.31 при $\alpha_R=5$ мэВ·нм в сильном поле F=0.2 мэВ/нм. Панель (a) показывает действительные части обеих компонент спинора, панель (b) – мнимые. Значение вероятности локализации для рис.2.31, как это следует из зелёной пунктирной кривой на рис.2.29(b), равно около 0.2, что отвечает значительно степени делокализации с большим вкладом состояний континуума.



Рисунок 2.31. Пространственная структура волновой функции в конце эволюции при $t=655 T_0$ для $\alpha_R=5$ мэВ·нм в сильном поле F=0.2 мэВ/нм. (а) Действительные части обеих компонент спинора $\psi_{1,2}$; (b) – мнимые части $\psi_{1,2}$ [149].

Представляет интерес спектральный анализ эволюции средних значений, в частности, Фурье-спектр координаты

$$X_{p} = \sum_{n=0}^{N-1} x(nT_{0}) e^{-in\omega_{p}/\omega_{0}}, \qquad (2.75)$$

найденный по значениям $x(nT_0)$ в дискретные моменты времени n=0,...,N-1, где частота $\omega_p = \omega_0 p/N$. Выражение (2.75), представляющее собой дискретное преобразование Фурье, при p=1,...,N/2 определяет X_p на частотах $\omega_p=0,...,\omega_0/2$ с расстоянием между соседними точками $\Delta \omega = \omega_0/N$. На рис.2.32 показан пример Фурье-спектра (2.75) при (а) F=0.16 мэВ/нм и (b) при F=0.22 мэВ/нм, для $\alpha_R=0$ (чёрные точки) и $\alpha_R=5$ мэВ·нм (красные точки). Частота измеряется в единицах частоты электрического поля ω_d .



Рисунок 2.32. Фурье-спектр координаты (2.75) при (а) *F*=0.16 мэВ/нм и (b) *F*=0.22 мэВ/нм, для α_{*R*}=0 (чёрные точки) и α_{*R*}=5 мэВ·нм (красные точки). Частота измеряется в единицах частоты электрического поля ω_{*d*} [149].

На рис.2.32 виден спектральный пик при $\omega_p = \omega_d$, т.е. на частоте внешнего поля, а также низкочастотная область пиков, отвечающая сравнительно медленной спиновой эволюции, с которой связана эволюция координаты согласно (2.72), (2.73). Влияние СОВ на спектр особенно проявляется в сильном поле на панели (b) рис.2.32, где оно модифицирует низкочастотную часть спектра из-за сильно проявляющейся спиновой динамики. Подводя итог, можно сказать, что СОВ влияет и на спиновую, и на орбитальную динамику, причём его влияние на эволюцию координаты в присутствии состояний непрерывного спектра замедляет переход в него для сильного электрического поля. Представляет интерес сравнить представленные в этом пункте численные результаты с аналитическими выражениями теории ионизации, что мы и обсудим в следующем пункте.

2.6.4. Сравнение численных и аналитических результатов по ионизации электрона из квантовой ямы со многими уровнями

Задача об ионизации атома в электрическом поле остаётся одной из наиболее сложных и интересных в аналитическом отношении проблем атомной физики [12], [13]. Не менее интересным является и соответствующая задача физики конденсированного состояния об ионизации квантовой ямы в поле электромагнитной волны [79]. Сложность состоит в том, что, несмотря на наличие хорошо обоснованных аналитических подходов к основной части зависимости скорости ионизации от амплитуды электрического поля, имеющей, как правило, универсальный экспоненциальный достаточно характер, вопрос 0 предэкспоненциальном множителе существенно зависит от конкретной системы. Ещё больший интерес задача приобретает при учёте спиновой степени свободы, когда структуры волновой функции имеет спинорный характер, подобно тому как это имеет место для задачи об ионизации электронов, подчиняющихся уравнению Дирака [190]. В данном пункте мы сопоставим полученные численные результаты для динамики состояний в глубокой КЯ с несколькими уровнями из предыдущего пункта 2.6.3. с аналитическими приближениями теории туннельной ионизации [150], как это уже делалось для задач об ионизации атомов водорода [54].

164

Начиная с работ Келдыша [24], Переломова [33], [34], Делоне и Крайнова [12], [13], а также других авторов, воздействие периодического электрического поля оценивается через параметр адиабатичности

$$\gamma = \frac{\hbar\omega\kappa}{F},\qquad(2.76)$$

где ω и $F=e\mathcal{E}_0$ есть частота и амплитуда электрического поля, а $\kappa=1/l$ есть типичная обратная длина локализации волновой функции в КЯ (где сама *l* в КЯ с основным уровнем E_1 может быть оценена по формуле $l = \sqrt{\hbar^2/2m|E_1|}$). В адиабатическом пределе $\gamma < 1$ вероятность ионизации в единицу времени оценивается как

$$P_0 \sim \exp(-2F_0/3F),$$
 (2.77)

где F_0 есть характерное электрическое поле туннельного барьера. Экспоненциальный характер зависимости вероятности ионизации от амплитуды поля *F* очевиден. В атомной физике задачи ионизации периодическим полем рассматриваются обычно в трёхмерных моделях, однако были построены и одномерные модели [33], [34], которые были развиты и для задачи ионизации полупроводниковой квантовой ямы в периодическом поле электромагнитной волны. Для последней задачи был получен следующий результат для скорости ионизации w_a и соответствующего времени ионизации $T=1/w_a$ [79]:

$$w_{a} = \frac{Ae^{\kappa d}}{1 + \kappa d/2} \left(1 - \frac{|E_{1}|}{U_{0}} \right) w_{\delta}, \qquad (2.78)$$

где E_1 и κ есть энергия и обратная длина локализации волновой функции на основном уровне в яме с глубиной U_0 и шириной d, а w_{δ} есть вероятность ионизации в одномерной яме с потенциалом в форме дельта-функции, которая в туннельном пределе γ <1 с параметром γ из (2.76) имеет вид [33], [34]

$$w_{\delta} \approx \frac{2|E_1|}{\hbar} \left(\frac{3F}{\pi F_0}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{2F_0}{3F}\right), \qquad (2.79)$$

где характерное поле барьера $F_0=2\kappa|E_1|$. Постоянная $A\sim1$ в (2.78) в нашей модели отражает специфику наличия очень далёких стенок на масштабе L>>l, d, что

приводит к необходимости учитывать многократные отражения уходящей волны. Для вычисления потока вероятности для такой волны $j_+=w_a/2$ [79] учёт таких многократных отражений даёт оценку для постоянной $A\sim1/2$. Другие параметры в приближении (2.78), (2.79) для нашей задачи берутся из предыдущего пункта [149]: высота барьера $U_0=27$ мэВ, ширина КЯ d=50 нм, эффективная масса m=0.0136 m_0 , энергия и длина локализации волновой функции для основного состояния $|E_1|=22.7$ мэВ и l=25 нм. Амплитуда поля барьера для нашего случая $F_0=2\kappa|E_1|=1.82$ мэВ/нм. Параметры электрического поля следующие: характерная частота $\omega=2\cdot10^{12}$ с⁻¹, амплитуда F=0.16...0.22 мэВ/нм, т.е. существенно меньше F_0 . Для таких параметров значение параметра адиабатичности (2.76) $\gamma=0.2...0.3$, что даёт основание использовать оценку (2.78), (2.79) для адиабатического предела, в рамках которого для четырёх значений амплитуды поля F=0.22, 0.20, 0.18 и 0.16 мэВ/нм мы вычисляем четыре времени ионизации T_A , T_B , T_C , T_D согласно $T=1/w_a$, где w_a даётся приближениями (2.78), (2.79). Это будет составлять аналитическую часть оценки времени ионизации.

Перейдём к описанию численной оценки времени ионизации. Базой для неё будет найденная численно вероятность локализации в КЯ P(t), графики для которой рассматривались в предыдущем пункте на рис.2.29. С этой вероятностью можно связать, вообще говоря, нестационарную скорость ионизации w(t) по следующей формуле [54]:

$$P(t) = P_0 \exp(-\Gamma(t)), \qquad \Gamma(t) = \int_{t_0}^t w(t') dt'. \qquad (2.80)$$

Значение показателя ионизации $\Gamma(t)=1$ в (2.80) определяет момент времени t=T, который естественно назвать характерным временем ионизации и сравнивать с аналитическим значением $T=1/w_a$, где w_a вычисляется в рамках приближения (2.78), (2.79). Результаты для временной зависимости $\Gamma(t)$, где время измеряется в единицах T_0 из (2.68), для рассмотренных выше параметров задачи с амплитудой электрического поля F=0.22, 0.20, 0.18 и 0.16 мэВ/нм представлены на рис.2.33 кривыми (А) синего цвета, (В) зелёного цвета, (С) красного цвета и (D) голубого

цвета, значения электрического поля для которых подписаны на рисунке. Соответствующие аналитические времена ионизации $T=1/w_a$, где w_a вычисляется по (2.78), (2.79), отмечены вертикальными линиями.



Рисунок 2.33. Временная зависимость показателя ионизации $\Gamma(t)$ из (2.80), где время измеряется в единицах T_0 из (2.68), для амплитуд электрического поля F на кривых с (A) F=0.22 мэВ/нм, (B) F=0.20 мэВ/нм, (C) F=0.18 мэВ/нм и (D) F=0.16 мэВ/нм. Аналитически полученные времена ионизации $T=1/w_a$, где w_a вычисляется по (2.78), (2.79), отмечены вертикальными линиями [150].

Для постоянной скорости ионизации w_a интеграл от неё по времени в (2.80), т.е. функция $\Gamma(t)$, представляет собой линейную функцию. Из рис.2.33 можно сделать вывод, что для найденной численно зависимости функция $\Gamma(t)$ сильно отличается от линейной, показывая уменьшающуюся со временем производную. Значения времени ионизации $T_A,...,T_D$, полученные в рамках приближения (2.78), (2.79), в приближении постоянной скорости ионизации должны сравниваться с моментом времени, для которого $\Gamma(t)=1$. На рис.2.33 видно, что такое соответствие наблюдается с хорошей точностью лишь для двух самых больших значений амплитуды электрического поля 0.22 и 0.20 мэВ/нм (синяя и зелёная кривые, времена ионизации T_A , T_B). Для более слабых полей 0.18 и 0.16 мэВ/нм (красная и голубая кривые) на рис.2.33 время достижения значения $\Gamma(t)=1$ либо значительно превосходит аналитическое значение (красная кривая, время T_C), либо $\Gamma(t)$ вовсе не достигает значения $\Gamma(t)=1$ (голубая кривая, время T_D), что говорит об отсутствии полной ионизации для последнего случая. Результаты на рис.2.33 говорит о том, что найденная численная динамика ионизации может существенно отличаться от простой аналитической аппроксимации с постоянной скоростью, особенно для не слишком сильного электрического поля, т.е. роль потенциала конфайнмента может быть сильнее, чем ожидалось.

Если мы сравним время начала отклонения функции $\Gamma(t)$ от линейной функции на рис.2.33 и время выхода среднего значения координаты за область КЯ на рис.2.30, то убедимся, что они оба лежат в интервале 100-150 Т₀, когда электрон начинает выходит из ямы в смысле превышения амплитудой среднего значения координаты характерного размера ямы. Это означает, что в разложении его волновой функции по базисным состояниям с этого момента всё большую роль начинают играть состояния континуума, которые в нашей модели рассматриваются на масштабе длинной (2L=320d), но всё же конечно нанопроволоки, что отвечает конечным размерам таких систем и в экспериментах. Это означает, что характеристики эволюции с такими модельными состояниями континуума будут отличаться от таковых для идеального, бесконечно протяжённого в пространстве набора базисных функций. Время достижения заметным ненулевым «краем» волновой функции стенки на расстоянии L=160 d можно оценить в 100-150 Т₀ исходя из графика зависимости средней координаты от времени на рис.2.30, что как раз отвечает моменту начала изменения профиля функции $\Gamma(t)$ на рис.2.33.

Графики показателя ионизации на рис.2.33 напоминают графики зависимости средней энергии от времени E(t) на рис.2.27. Это наводит на мысль сравнить зависимости $\Gamma(t)$ и E(t). По аналогии с функцией (2.70), описывающей

эффективность переворота спина, чьи графики показаны на рис.2.28, можно определить функцию

$$f(t) = \frac{\Gamma(t)}{E(t)},$$
(2.81)

иллюстрирующую процесс ионизации, который характеризуется пересечением функцией E(t) граничного значения E(t)=0, разделяющего дискретную и непрерывную часть спектра. Для момента времени, когда E(t)=0, функция (2.81) должны иметь полюс, положение которого можно сравнить с аналитически найденными временами ионизации $T_A,...,T_D$, описанными выше. Зависимость функции (2.81) от времени показана на рис.2.34 для тех же обозначений и параметров, что на рис.2.33. Можно видеть, что положение полюса находится в хорошем соответствии с временами T_A , T_B для сильных полей (синяя и зелёная кривые на рис.2.34) и не слишком хорошо соотносится со временем T_C для красной кривой в более слабом поле. Что касается голубой кривой при F=0.16 мэВ/нм, то для неё полюс функции (2.81) вовсе отсутствует, поскольку зависимость E(t) не переходит через нуль, т.е. в таком слабом поле ионизация в смысле поведения средней энергии не наступает.

Анализируя результаты на рис.2.33 и рис.2.34, можно сделать вывод, что аналитическая теория туннельной ионизации даёт хорошие результаты в плане соответствия с численными расчётами для достаточно сильных полей, когда сам факт ионизации, т.е. перехода средней энергии в область энергий континуума, надёжно наблюдается.



Рисунок 2.34. Временная зависимость функции f(t) из (2.81), связывающей показатель ионизации $\Gamma(t)$ из (2.80) со средней энергией E(t). В моменты времени, когда E(t)=0, функция (2.81) имеет полюс, положение которого можно сравнить с аналитически найденными временами ионизации $T_A,...,T_D$. Для голубой кривой при F=0.16 мэВ/нм полюс отсутствует, поскольку зависимость E(t) не переходит через нуль [150].

Для пограничных значений амплитуды поля или для слабых полей, когда сам факт ионизации в упомянутом смысле поведения функции (2.81) вовсе имеет места на рассмотренных временах, численные результаты говорят о более сильном влиянии потенциала КЯ, локализующего электронные состояния на существенно больших временах, чем предсказывается приближениями (2.78), (2.79), или вовсе не показывают ионизации. Указанные различия можно отнести на счёт различий теории для ионизации из основного состояния КЯ и рассмотренной нами численно задачи со многими уровнями в КЯ, в которой важную роль играют переходы между локализованными состояниями в КЯ в присутствии СОВ, как это было выяснено в предыдущем пункте 2.6.3. Таким образом, поведение ионизации из КЯ со многими уровнями и СОВ в электрическом поле косвенно доставляет информацию и о структуре уровней в ней, если диагностируется меньшая скорость ионизации по сравнению с описанной теорией.

2.7. Режимы туннелирования, LZSM интерференции, переворота спина и субгармоник ЭДСР в двойной КТ со СОВ

2.7.1. Модель и основные параметры

В этом параграфе мы вновь рассмотрим задачу о состояниях в двойной КТ со СОВ, которая была представлена в параграфах 2.1. – 2.3. Отличия будут состоять в следующем. Во-первых, нашей целью будет моделирование недавних экспериментов по транспорту в двойных КТ в нанопроволоках на основе GaAs, созданных полем затвора в двумерном газе дырок, а не электронов, которые представлены в работах нашего соавтора С.А. Студеникина из Национального совета по исследованиям (Оттава, Канада) [60], [249], [250], [204], [187]. В этих структурах исследовалась в том числе динамика одночастичных дырочных состояний в периодическом электрическом поле с проявлением ЭДСР и эффектов LZSM-интерференции, которые обсуждались в п.1.2.2 и 1.2.3. Во-вторых, отличительной чертой экспериментов в цитированных выше работах с двойной КТ является достаточно большое количество параметров, которые необходимо ввести в теорию, что иллюстрируется рисунками 2.35 и 2.36:

- Смещение дна U_d (detuning) потенциальной ямы одной КТ относительно другой;
- Зеемановское расщепление уровней ∆_Z, которое для простоты полагается нами равным для обеих КТ;
- Туннельное расщепление в двойной КТ, описываемое матричным элементом γ потенциала барьера между состояниями с одним и тем же спином в присутствии магнитного поля, находящимися в разных КТ;
- Амплитуда СОВ, выраженная величиной матричного элемента α того же потенциала барьера между состояниями с разным спином, находящимися в разных КТ;

- 5) Частота ω периодического электрического поля, вызывающего различные типы переходов;
- 6) Амплитуда V_d периодического электрического поля;
- 7) Начальное условие для эволюции с точки зрения локализации в левой или правой КТ и начальная проекция спина на направление магнитного поля.

Скалярный потенциал переменного электрического поля V(x,t) содержит как статический вклад U_d , описывающий смещение (detuning) минимума одной КТ относительно другой, так и нестационарный вклад вида V_d $f(x)\sin\omega t$, определяемый амплитудой V_d , пространственным профилем f(x) и временной зависимостью sin ωt . Из рис.2.35 и 2.36 можно сделать вывод, что минимальная модель в двойной КТ с учётом спина должна содержать минимум четыре уровня $E_1...E_4$, учитывающие туннельное и спиновое расщепления.



Рисунок 2.35. Модель двойной квантовой точки в одномерном приближении. Показаны четыре нижних уровня $E_1...E_4$, сформированные туннельным расщеплением и зеемановским расщеплением Δ_Z в постоянном магнитном поле. Функция V(x,t) описывает потенциал электрического поля, который может включать статический потенциал смещения U_d дна одной из КТ (detuning) и нестационарный потенциал $V_d f(x) \sin \omega t$ [152].

Это означает, что динамические явления, в том числе явления LZSMинтерференции, с самого начала будут рассматриваться за рамками двухуровневого приближения, которое было описано в параграфе 1.2. В экспериментах [60], [249], [250], [204], [187] регистрировался туннельный ток через структуру с двойной КТ, типичная схема которой показан выше на рис.1.11. Схема режимов туннелирования в такой структуре показана на рис.2.36 и обсуждается в следующем пункте. Полное описание такой системы с электродами является более сложным, чем модель с двойной КТ на рис.2.35. В упомянутых экспериментах имел место режим последовательного туннелирования с одной дыркой, проводящей много времени в области двойной КТ, поскольку проницаемость барьеров между КТ и электродами была очень мала, на порядок меньше проницаемости туннельного барьера между КТ. При таком режиме транспорта имело место фактически три последовательных процесса:

- Туннелирование одиночной дырки из правого электрода в правую КТ, что являлось её инициализацией (начальным состоянием в нашей модели эволюции);
- Эволюция дырки в области двойной КТ с многочисленными осцилляциями и спиновой динамикой, описание которой является нашей главной задачей;
- Туннелирование дырки из левой КТ в левый электрод-коллектор, что завершало процесс транспорта через всю структуру.

Из трёх описанных фаз процесса переноса в нашей модели мы сосредоточимся на второй, связанной со спин-зависимым туннелированием между правой и левой КТ. Действительно, наличие дырки в левой КТ является необходимым условием появления тока через всю структуру, который может быть спин-зависимым. Основные события разворачиваются именно между двумя КТ, поэтому расчёт усреднённых по времени величин, обсуждаемых ниже, в модели с потенциалом на рис.2.35 для режимов эволюции на рис.2.36, представляется оправданным.



Рисунок 2.36. Различные режимы эволюции дырочных состояний в двойной КТ в периодическом поле с частотой ω . Дырка со спином вниз инжектируется из правого электрода в правую КТ, далее туннелирует через барьер, испытывая ряд осцилляций между КТ, и покидает структуру через левый электрод. (а) Туннелирование с сохранением спина с характерной скоростью γ ; (b) Туннелирование с переворотом спина с характерной скоростью α ; (c) ЭДСР в правой КТ без туннелирования с характерной скоростью β ; (d) Гибридный режим с выполнением всех резонансных условий для режимов (а)–(с) [152].

Гамильтониан задачи имеет следующий вид [152], [154]:

$$H = H_{2QD} + H_Z + H_{SO} + V(x, t), \qquad (2.82)$$

и до момента t=0 включения периодического электрического поля является стационарным. Первое слагаемое $H_{2QD} = \hbar^2 k_x^2 / 2m + U(x)$, где потенциал двойной ямы U(x) имеет вид (2.1). Это означает, что мы работаем в приближении скалярной эффективной массы, что является оправданным и для дырочных состояний в двумерном газе в GaAs, в котором потенциалом затворов сформирован профиль нанопроволоки с двумя минимумами, отвечающими двум КТ, как это показано на рис.1.11 и для которого построена модель с профилем

174

потенциала на рис.2.35. Второе слагаемое в (2.82) имеет вид обычного зеемановского слагаемого

$$H_Z = \frac{1}{2}g\mu_B B_z \sigma_z , \qquad (2.83)$$

генерирующего зеемановское расщепление $\Delta_Z = g\mu_B B_Z$. Выражение (2.83) означает, что мы работаем с состояниями дырок, имеющими проекцию спина $\pm 1/2$ на направление магнитного поля, т.е. с лёгкими дырками. Вообще говоря, структура дырочных состояний в полупроводниковых нанопроволоках из GaAs, полученная на основе гамильтониана Латтинжера, является достаточно сложной и включает в себя вклады как от тяжёлых, так и от лёгких дырок [75], причём для некоторых вариантов геометрических параметров нанопроволоки функции лёгких дырок могут доминировать в структуре основного состояния в центральной области её сечения. Мы основываем выбор модели на данных экспериментов [60], [249], [250], [204], [187], согласно которым в перпендикулярном к 2D газу магнитном поле формировались уровни с зеемановским расщеплением, адекватно описываемым гамильтонианом (2.83).

Далее в гамильтониане (2.82) фигурирует СОВ-слагаемое, которое мы записываем в виде вклада Дрессельхауза, линейного по компоненте импульса вдоль нанопроволоки:

$$H_{SO} = \beta_D \sigma_x k_x. \tag{2.84}$$

Вклад (2.84) имеет линейный по k_x характер, что уже обсуждалось при записи гамильтониана (2.52) также в одномерной структуре с КТ в нанопроволоке. Линейный вклад по квазиимпульсу в СОВ Дрессельхауза в низкоразмерных структурах может присутствовать и для дырок с проекцией момента $\pm 3/2$ [97]. Известно, что СОВ Дрессельхауза для дырок имеет и линейные, и кубические вклады по компонентам квазиимпульса [261], поэтому выбор наиболее простого неисчезающего вклада (2.84) является оправданным. Следует отметить, что точный вид СОВ с точки зрения зависимости от квазиимпульса не является принципиальным для наших целей: роль СОВ заключается в связи состояний с различной проекцией спина на направление магнитного поля (ось *Oz*), что может реализоваться как с линейной, так и с кубической зависимостью гамильтониана СОВ от квазиимпульса. В уравнениях для эволюции входят лишь матричные элементы от СОВ, которые могут генерироваться при различной зависимости от квазиимпульса.

Последнее слагаемое V(x,t) в гамильтониане (2.82) описывает вклад скалярного потенциала электрического поля. Он имеет две составляющие, статическую и динамическую, как это обсуждалось при упоминании рис.2.35. До момента времени t=0 есть только статическая составляющая:

$$V(x, t < 0) = U_d f_d(x),$$
 (2.85)

которая описывает статическое смещение (detuning) дна одной КТ относительно другой, как это показано на рис.2.35, причём знак U_d<0 отвечает смещению минимума правой КТ вниз. Функция $f_d(x)$ описывает профиль потенциала смещения, добавляемого к потенциалу (2.1) симметричной КЯ, выбираемого из условия гладкости суммарного потенциала $U(x) + U_d f_d(x)$. Мы использовали профиль функции $f_d(x) = (x/d_1)^3 - 3/2 \cdot (x/d_1)^2$ с параметром $d_1 = 1.5d$, которая адекватно моделирует потенциал двойной КТ со смещением минимумов, как это видно на рис.2.35. Мы находим уровни энергии E_n и собственные функции $\varphi_n(x)$ статического гамильтониана (2.82) со вкладами (2.83)-(2.85). Вообще говоря, в двойной КТ с параметрами, близкими к экспериментам, формируется более чем четыре уровня, показанные на рис.2.35. При используемых значениях амплитуды периодического поля, однако, более 92% нормы волновой функции, как показывают наши расчёты, формируется на состояниях, отвечающих нижним четырём уровням $E_1...E_4$ на рис.2.35, отвечающим туннельному расщеплению основного состояния в уединённой КТ и спиновому расщеплению каждого орбитального состояния в магнитном поле.

Динамическая часть задачи решается, когда с момента времени t=0 к потенциалу (2.85) добавляется потенциал периодического электрического поля с амплитудой V_d и частотой ω , что даёт нам вместо (2.85) выражение

$$V(x, t>0) = (U_d + V_d \sin \omega t) f_d(x).$$
(2.86)

Мы ищем волновую функцию по стандартной схеме (2.14), (2.15), раскладываю функцию базисным состояниям $\varphi_n(x),$ искомую по являющимся двухкомпонентными спинорами, И решая уравнение эволюции для коэффициентов $C_n(t)$, определяющих заселённости $|C_n(t)|^2$ уровней E_n . Начальные условия $C_n(0)$ выбираются нами исходя из экспериментов [60], в которых дырка со спином вниз инжектировалась в правую КТ, поэтому мы принимаем начальное условие

$$\sigma_z^R(0) = -1.$$
 (2.87)

Упомянутые параметры туннелирования α , β , γ в нашей модели получаются автоматически из первых принципов расчёта матричных элементов с полным расчётом квантовых состояний в потенциале двойной КТ, что выгодно отличает наш подход от модельных представлений в более ранней работе [60]. Мы решаем нестационарное уравнение Шрёдингера как с непрерывным временем, так и в стробоскопические моменты t=nT, где $T=2\pi/\omega$ есть период электрического поля. В последнем случае используются методы теории Флоке, описанные в п.2.3.2. После получения коэффициентов $C_n(t)$ и волновой функции (2.14) мы вычисляем величины, связанные с туннелированием дырки из правой КТ в левую КТ. Среди них наибольший интерес представляет вероятность пребывания в левой КТ

$$P_{L}(t) = \int_{-\infty}^{0} |\psi(x,t)|^{2} dx$$
 (2.88)

и проекция спина, измеренная по области левой КТ, а также проекция спина, измеренная по правой КТ:

$$\sigma_z^L(t) = \int_{-\infty}^0 \psi^+(x,t) \sigma_z \psi(x,t) dx, \qquad (2.89)$$

$$\sigma_z^R(t) = \int_0^{+\infty} \psi^+(x,t) \sigma_z \,\psi(x,t) dx. \qquad (2.90)$$

Вероятность пребывания в правой КТ связана с (2.87) условием нормировки $P_L(t)+P_R(t)=1$, поэтому $P_R(t)$ не вычисляется отдельно. Спиновые же проекции (2.89) и (2.90) в силу наличия СОВ не связаны друг с другом подобным условием и потому рассчитываются каждая отдельно. Помимо мгновенных значений (2.88)-

(2.90) нас будут интересовать значения этих величин, усреднённых по достаточно большому числу *N* периодов электрического поля, как это было при регистрации туннельного тока в экспериментах [60], [249], [250], [204], [187]:

$$P_{L} = \frac{1}{NT} \int_{0}^{NT} P_{L}(t) dt, \qquad (2.91)$$

$$\sigma_z^{(L,R)} = \frac{1}{NT} \int_0^{NT} \sigma_z^{(L,R)}(t) dt.$$
 (2.92)

2.7.2. Режимы эволюции и туннелирования с сохранением и переворотом спина, рассматриваемые в пространстве параметров системы

Основные режимы эволюции с учётом спиновой динамики в периодическом электрическом поле с частотой ω показаны на рис.2.36. Дырка со спином вниз инжектируется из правого электрода в правую КТ, далее туннелирует через барьер, испытывая ряд осцилляций между КТ, и покидает структуру через левый электрод. Первым режимом на панели (а) является туннелирование с сохранением спина с характерной скоростью γ. максимумы этого туннелирования наблюдаются при выполнении следующего условия [240], [126]:

$$k_1 \hbar \omega = |U_d|, \qquad (2.93)$$

что отвечает целому числу k_1 фотонов с частотой ω , при котором их энергия равна разности положения уровней с одинаковой проекцией спина, как это видно на рис.2.36(а). Условие (2.93) можно назвать условием photon assisted tunneling (PAT). Второй режим эволюции на рис.2.36(b) отвечает туннелированию с переворотом спина с характерной скоростью α благодаря наличию СОВ. Его максимумы, как это видно на рис.2.36(b), отвечают РАТ-условию с другим целым числом k_2 при

$$k_2 \hbar \omega = |U_d| + \Delta_Z, \qquad (2.94)$$

при котором происходит туннелирование с переворотом спина с первого уровня, отвечающего правой КТ, на четвёртый уровень, отвечающий левой КТ. Далее, возможен переворот спина в одной правой КТ без туннелирования в режиме

ЭДСР с характерной скоростью β, как это показано на рис.2.36(с), при выполнении условия

$$k_3 \hbar \omega = \Delta_Z, \qquad (2.95)$$

с другим целым значением k_3 . Условие (2.95) при $k_3=1$ отвечает основной гармонике ЭДСР, а значения $k_3>1$ отвечают субгармоникам ЭДСР, которые будут подробно рассматриваться в следующем пункте. Наконец, на панели 2.36(d) показан обнаруженный нами новый, «гибридный» режим, при котором условия (2.93) - (2.95) удовлетворяются одновременно, что имеет место при условии

$$k_2 = k_1 + k_3 \,. \tag{2.96}$$

При выполнении условия (2.96), как это видно на рис.2.36(d), все три режима эволюции реализуются в одной точке пространства параметров системы, причём в динамике участвуют все четыре уровня на рис.2.36, т.е. описание принципиально выходит за рамки двухуровневой модели.

Мы начнём описание туннелирования с сохранением и переворотом спина для более простых случаев (2.93), (2.94), которые могут быть проанализированы в рамках двухуровневого приближения, поскольку в каждом из этих процессов участвует фактически одна пара уровней, как это видно на рис.2.36. Для нашей модели параметр адиабатичности (1.19) $\Delta \sim 10^{-4} \dots 10^{-3}$, что отвечает быстрому прохождению уровней друг мимо друга на каждом периоде электрического поля. В этом случае вероятность перехода, усреднённая по многим периодам, может быть оценена [240], [126] согласно (1.21), где $\varepsilon_0 = U_d$ для процессов (2.93) и $\varepsilon_0 = U_d + \Delta_Z$ для процессов (2.94), где $A = V_d$. Мы проведём сопоставление численного расчёта эволюции с этим аналитическим приближением для следующих параметров, отвечающих экспериментам [60], [250]: эффективная масса дырки $m=0.11m_0$, расстояние между минимумами КТ на рис.2.35 2d=116 нм, высота *g*-фактор *g*=1.35, барьера $U_0 = 5$ мэВ, амплитуда COB Дрессельхауза $\beta_D=3$ мэВ·нм. Для таких параметров значения скоростей туннелирования с сохранением и переворотом спина, оцениваемые через соответствующие матричные элементы, составляют γ~1 мкэВ и α~0.45 мкэВ соответственно, а значение скорости переворота спина для ЭДСР в одной КТ β ~0.1 мкэВ. Начальное состояние моделируется нами как волновой пакет с центром в правой КТ и шириной *d*, имеющий проекцию спина вниз. Для типичных значений смещения (detuning) $|U_d|$ ~20...100 мкэВ, отвечающих экспериментам, начальное состояние на 90...93% нормы определяется вкладом функции φ_1 для нижнего уровня в правой КТ на рис.2.35, 2.36.

Мы начнём моделирование эволюции с расчёта средних по времени значений (2.91), (2.92) для фиксированного смещения минимумов U_d=-73 мкэВ и фиксированного магнитного поля B_z=0.125 T, отвечающего зеемановскому расщеплению Δ_Z =9.75 мкэВ. Двумя переменными параметрами будут амплитуда периодического поля V_d в (2.86), изменяющаяся в интервале от 0 до 250 мкэВ и 1/f, обратная отвечающая полосе частот *f*=1...5 частота поля ГГц. соответствующей экспериментам. Зависимость средней вероятности туннелирования (2.91) на карте параметров (V_d, 1/f) показана на рис.2.37 для (a) аналитического двухуровневого приближения (1.21) и (b) для численного расчёта в рамках нашей модели. На панели (b) рис.2.37 чёрные стрелки показывают максимумы туннелирования с сохранением спина при выполнении условия (2.93), а светлые стрелки показывают максимумы туннелирования с переворотом спина в рамках условия (2.94). Из сравнения панелей (а) и (b) можно сделать вывод, что оба этих процесса с хорошей точностью описываются (1.21)рамках двухуровневого приближения. результатом В Поскольку туннелирование носит спин-зависимый характер, представляет интерес построить карты средних значений и для проекций спина (2.92), которые показаны на рис.2.38.


Рисунок 2.37. Зависимость среднего по времени значения вероятности туннелирования (2.91) в левую КТ от амплитуды V_d и обратной частоты 1/f периодического поля (2.86), вычисленная в рамках (а) аналитического двухуровневого приближения (1.21) и (b) полной численной модели. Чёрные стрелки на (b) показывают максимумы туннелирования с сохранением спина (2.93), светлые стрелки показывают максимумы туннелирования с переворотом спина (2.94) [152].





Рисунок 2.38. Зависимость среднего по времени значения спиновой проекции (2.92) (а) в левой КТ и (b) в правой КТ для тех же параметров, что на рис.2.37. Тёмные участки на панели (а) отвечают туннелированию с сохранением спина, светлые – с переворотом спина. На панели (b) красные стрелки (A), (B) отмечают две гармоники ЭДСР (2.95) с основной гармоникой $k_3=1$ (A) и второй суб-гармоникой $k_3=2$ (B) [152].

Тёмные участки на панели (а) рис.2.38 отвечают туннелированию с сохранением спина, светлые – с переворотом спина. На панели (b) оба типа туннелирования отвечают светлым участкам, а красные стрелки (A), (B) отмечают две гармоники ЭДСР (2.95) с основной гармоникой $k_3=1$ (A) и второй суб-гармоникой $k_3=2$ (B). Классический режим ЭДСР без туннелирования, как это показано на рис.2.36(c), реализуется в правой КТ, поэтому для его визуализации необходимо строить карту средних значений проекции σ_Z^R в правой КТ. На панели (b) рис.2.38 видно, что вторая суб-гармоника ЭДСР с $k_3=2$, отмеченная стрелкой (B), почти совпадает

182

с максимумами туннелирования (2.93) и (2.94) с k_1 =15 и k_2 =17 соответственно. Этот пример показывает возможность проявления «гибридного» резонанса при выполнении условия (2.96), который уже не описывается в рамках двухуровневого приближения.

Для выяснения возможных режимов эволюции целесообразно построить карту средних значений спиновых проекций (2.92) в координатах (B_z , f) при фиксированных амплитудах смещения минимумов U_d и периодического поля V_d . Результаты показаны на рис.2.39 при U_d =-70 мкэВ и V_d =100 мкэВ.



Рисунок 2.39. Зависимость среднего по времени значения спиновой проекции (2.92) (а) в левой КТ и (b) в правой КТ для фиксированной амплитуде смещения минимумов U_d =-70 мкэВ U_d и амплитуде периодического поля V_d =100 мкэВ. Семейство горизонтальных линий на обеих панелях отвечают туннелированию с сохранением спина (2.93), семейство светлых наклонных линий – туннелированию с переворотом спина (2.94). На (b) видно ещё одно семейство наклонных линий, отвечающих ЭДСР и его суб-гармоникам (2.95) в правой КТ. Видна основная гармоника, обозначенная цифрой 1, а также две субгармоники, обозначенные цифрами 2 и 3.Развёртка эволюции по времени в точках A, B, C, D будет показана ниже. Точка D отвечает гибридному резонансу (2.96) [152].

На рис.2.39 семейство горизонтальных линии на обеих панелях (тёмные на панели (а) и светлые на панели (b)) отвечают туннелированию с сохранением спина (2.93), семейство светлых наклонных линий – туннелированию с переворотом

спина (2.94). На панели (b) видно ещё одно семейство наклонных линий, отвечающих ЭДСР и его суб-гармоникам (2.95) в правой КТ. Видна основная гармоника, обозначенная цифрой 1, а также две субгармоники, обозначенные цифрами 2 и 3. Развёртка эволюции по времени в точках А, В, С, D будет показана ниже. Точка D отвечает гибридному резонансу (2.96), схематически показанному на рис.2.36(d), когда в одной точке пространства параметров реализуются все три условия (2.93)-(2.95).

Примеры с развёрткой эволюции во времени мы начнём с точки A на рис.2.39(b), отвечающей туннелированию с сохранением спина. В этом случае, схема которого показана на рис.2.36(a), в динамике участвуют в основном уровни E_1 и E_3 , отвечающие состоянием в правой и левой КТ со спином вниз. Результаты для эволюции вероятности туннелирования (2.88) и спиновой проекции (2.89), (2.90) в левой и правой КТ вместе с заселённостями уровней $|C_1(t)|^2$ и $|C_3(t)|^2$ показаны на рис.2.40.



Рисунок 2.40. Зависимость от времени характеристик эволюции для точки A на рис.2.39(b) при туннелировании с сохранением спина. Время отсчитывается в единицах периода электрического поля *T*. (a) Вероятность туннелирования (2.88); (b), (c) Спиновая проекция (2.89), (2.90) в левой и правой KT; (d), (e) Заселённости уровней $E_{1,3} |C_1(t)|^2 \mu |C_3(t)|^2$ [152].

Время на рис.2.40 и других примерах эволюции отсчитывается в единицах периода электрического поля *Т*. Динамика вероятности *P*_L на панели (а)

показывает периодическое туннелирование с характерным временем $\tau_t \sim 17$ T, что для выбранных параметров задачи равно ~5 ns, что отвечает типичному времени, оцениваемому по значению матричного элемента потенциала туннельного барьера $\gamma=1$ мкэВ, связывающего состояния с одинаковым спином в разных КТ. Проекция спина в левой и правой КТ на панелях (b), (c) показывает осцилляции без смены знака, т.к. это туннелирование с сохранением спина. Вероятности заселённости $|C_1(t)|^2$ и $|C_3(t)|^2$ на панелях (d), (e) демонстрируют осцилляции с тем же периодом τ_t , что и вероятность туннелирования.

Более богатой является динамика для точки (В) на рис.2.39(b), отвечающей туннелированию с переворотом спина, которая показана на рис.2.41. Наряду со средними значениями (2.88)-(2.90) на нём показана эволюция вектора (2.49), компоненты которого есть средние значения спиновых проекций, рассчитанных по всей области двойной КТ, т.е.

$$S_i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^+(x,t) \sigma_i \psi(x,t) dx. \qquad (2.97)$$

Из рис.2.41(а) видно, что туннелирование происходит с характерным временем $\tau_t \sim 55 \text{ T} \sim 18 \text{ нс}$, что согласуется с оценкой $\sim \hbar/\alpha$ по матричному элементу от СОВ между состояниями с разной проекцией спина в левой и правой КТ. С этим же периодом осциллируют проекции спина в левой и правой КТ на панелях (b), (c). Картина стробоскопической эволюции вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ с компонентами (2.97) показана на панели (d) рис.2.41. Она говорит о том, что спин, испытывая прецессию небольшого радиуса в плоскости (S_x, S_y), движется от начальной точки (S) на южном полюсе к северному полюсу и обратно, не оставаясь на поверхности сферы в силу присутствия СОВ. С тем же периодом $2\tau_t \sim 110 \text{ T}$ осциллируют и заселённости уровней $E_{2,4}$, которые в основном участвуют в этом режиме динамики, как это видно на панелях (e), (f) рис.2.41. Таким образом, при туннелировании с переворотом спина время туннелирования $\tau_f \sim 55 \text{ T} \sim 18 \text{ нс}$, что меньше типичного времени спиновой релаксации в нанопроволоках на основе GaAs с высокой степенью чистоты. Это наблюдение говорит о перспективности

использования туннельных структур для контролируемого переворота спина в присутствии СОВ.



Рисунок 2.41. Зависимость от времени характеристик эволюции для точки В на рис.2.39(b) при туннелировании с переворотом спина. (a) Вероятность туннелирования (2.88); (b), (c) Спиновая проекция (2.89), (2.90) в левой и правой КТ; (d) Эволюция вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ со средними значениями проекций спина (2.97) на сфере Блоха с начальной точкой S на южном полюсе; (e), (f) Заселённости уровней $E_{2,4} |C_2(t)|^2$ и $|C_4(t)|^2$ [152].

Важность туннелирования можно проиллюстрировать при сравнении времени переворота спина на рис.2.41 с классическим ЭДСР в одиночной правой KТ, пример которого показывает точка С на рис.2.39(b). Зависимость наблюдаемых величин от времени для точки С показана на рис.2.42. Панель (a) показывает вероятность туннелирования (2.88), которая всё время остаётся крайне низкой, что отвечает почти полному отсутствию туннелирования. Панели (b), (c) показывают эволюцию спиновой проекции (2.89), (2.90) в левой и правой КТ. Динамика спина показывает сравнительно медленный переворот спина в правой КТ на временах т_г~520 T~130 нс, что отвечает классическому ЭДСР. Панель (d) показывает эволюцию вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ со средними значениями проекций спина (2.97) на сфере Блоха с начальной точкой S на южном полюсе, демонстрирующую плавный поворот на π на времени τ_f. Панели (e), (f)

показывают заселённости уровней $E_{1,2} |C_1(t)|^2$ и $|C_2(t)|^2$, где виден обмен заселённостями между уровнями в правой КТ со спином вниз и вверх на времени



Рисунок 2.42. Зависимость от времени характеристик эволюции для точки С на рис.2.39(b) при ЭДСР в правой КТ без туннелирования. (a) Вероятность туннелирования (2.88); (b), (c) Спиновая проекция (2.89), (2.90) в левой и правой КТ; (d) Эволюция вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ со средними значениями проекций спина (2.97) на сфере Блоха от начальной точки S на южном полюсе; (e), (f) Заселённости уровней $E_{1,2} |C_1(t)|^2$ и $|C_2(t)|^2$; (g), (h) Заселённости уровней $E_{3,4}$ $|C_3(t)|^2$ и $|C_4(t)|^2$; (i) Зависимость частоты Раби Ω_R переворота спина в правой КТ в единицах ω как функция амплитуды поля V_d (кривая A) вместе с линейной зависимостью (B) для строго двухуровневой системы. Кривая (C) показывает вероятность туннелирования \tilde{P}_L , полученную из (2.88) усреднением по одному периоду переворота спина [152].

Несмотря на слабое туннелирование в примере на рис.2.42, для понимания механизма ЭДСР в двойной КТ нам нужны и заселённости уровней *E*_{3,4} в соседней

КТ, показанные на панелях (g), (h). Их амплитуда не превосходит 1-2%, однако в силу большого расстояния, проходимого дыркой при туннелировании, по сравнению с амплитудой колебаний минимума потенциала в правой КТ, которая будет обсуждаться ниже, их роль в присутствии СОВ для динамики спина является существенной. Для иллюстрации рассмотрим зависимость частоты Раби Ω_R переворота спина в правой КТ в единицах ω от амплитуды поля V_d , показанной на панели (i) рис.2.42 как красная кривая (кривая A). Для сравнения рядом с ней построена линейная зависимость (B) из (1.15) для строго двухуровневой системы. Можно видеть, что даже при наличии слабого туннелирования, т.е. с выходом за пределы двухуровневого описания, зависимость $\Omega_R(V_d)$ становится нелинейной, как это уже отмечалось в параграфе 2.3.

Роль туннелирования подчёркивается построением на панели (i) рис.2.42 кривой (С), которая показывает вероятность туннелирования \widetilde{P}_L , полученную из (2.88) усреднением по одному периоду переворота спина. Эта кривая имеет пики при тех же значениях V_d , что и зависимость частоты переворота спина Ω_R , что говорит о влиянии даже слабого туннелирования на динамику спина. Необходимо подчеркнуть, что на панели (i) рис.2.42 видно, что при наличии туннелирования кривая (А) идёт в среднем выше, чем прямая (В), т.е. наличие слабого туннелирования ускоряет переворот спина. В работе [201] частота Раби оценивалась по амплитуде колебаний Δx минимума потенциала в одиночной КТ, помещённой в периодическое поле. Мы описывали подход этой работы в главе 1 в выражениях (1.24), (1.25). Наши расчёты показывают, что амплитуда колебаний в нашем примере на рис.2.42 составляет $\Delta x \sim 0.2$ нм, откуда по формулам (1.24), (1.25) мы получаем, что время переворота спина т_с~500 Т, что находится в хорошем согласии в численными результатами на рис.2.42. Таким образом, более длинная (на три порядка) дистанция 2d=116 нм, преодолеваемая дыркой при туннелировании между КТ, оказывает через механизм СОВ существенное влияние на частоту переворота спина Ω_R даже при вкладе состояний соседней КТ

на уровне 1-2% при слабом туннелировании. Этот результат говорит о возможности ускорения переворота спина по механизму ЭДСР при использовании слабого туннелирования в соседнюю КТ с участием СОВ.

Наконец, обратимся к примеру «гибридного» резонанса (2.96) для точки D на рис.2.39(b) при k_1 =5, k_2 =6 и k_3 =1, где все три процесса (2.93 –(2.95) протекают в одной точке пространства параметров системы. Эволюция наблюдаемых величин и заселённостей для этого примера показана на рис.2.43.



Рисунок 2.43. Зависимость от времени характеристик эволюции для точки D на рис.2.39(b) при «гибридном» резонансе (2.96). (a) Вероятность туннелирования (2.88); (b), (c) Спиновая проекция (2.89), (2.90) в левой и правой КТ; (d) Эволюция вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ со средними значениями проекций спина (2.97) на сфере Блоха от начальной точки S на южном полюсе; (e) – (i) Заселённости уровней E_1, \dots, E_4 , показывающие вклад всех четырёх состояний [152].

Панель (а) опять показывает вероятность туннелирования (2.88), панели (b), (c) показывают спиновую проекцию (2.89), (2.90) в левой и правой КТ, демонстрирующую переворот спина в левой и правой КТ с характерным

временем т_{/~}100 *T*~29 нс. Панель (d) показывает эволюцию вектора $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ на сфере Блоха, демонстрирующую достаточно сложную динамику внутри сферы. Панели (e) – (i) показывают заселённости уровней E_1, \ldots, E_4 , демонстрирующие вклад всех четырёх состояний при «гибридном» резонансе. Время переворота спина на рис.2.43 несколько выше, чем на рис.2.41 при туннелировании с переворотом спина. Тем не менее, преимуществом «гибридного» режима является видимый на рис.2.43 переворот спина как в правой, так и в левой КТ, в то время как на рис.2.41 переворот наблюдается только в левой КТ. Таким образом, «гибридный» резонанс сочетает в себе черты переворота спина в той же КТ, где он был инициализирован, как в классическом ЭДСР на рис.2.42, и черты туннелирования с переворотом спина на рис.2.41, когда спин переворачивается существенно быстрее (на порядок), чем при классическом ЭДСР.

Подводя итого этого пункта, можно сделать вывод, что резонансные условия (2.93)- (2.95) в двойной КТ с СОВ в периодическом электрическом поле могут реализоваться как в различных точках в пространстве параметров, так и в одной точке при «гибридном» ЭДСР (2.96). Выбирая наиболее подходящий режим для конкретных условий, можно получить быстрое туннелирование с медленной или замороженной спиновой динамикой, или, наоборот, быструю динамику спина с туннелированием, или же медленный классический ЭДСР без существенного туннелирования. Манипулирование параметрами системы с двойной КТ в присутствии СОВ позволяет получить богатый набор режимов эволюции положения электрона (дырки) и его спина, что важно для приложений в спинтронике и наноэлектронике.

2.7.3. Туннелирование и переворот спина при «медленной» эволюции

Формула Ландау-Зенера (1.18) с параметром адиабатичности (1.19) описывает вероятность перехода при однократном прохождении уровней, энергии которых в адиабатическом базисе определяются в (1.17). Представляет интерес провести численное моделирование эволюции в нашей системе с двойной КТ в

режиме ещё не адиабатичной (δ >1), но сравнительно медленной эволюции, когда параметр δ ещё не выше единицы, но выполняется условие

$$\Delta_Z < \alpha, \ \gamma, \ \ \hbar\omega \le \Delta_Z, \tag{2.98}$$

где γ и α есть характерные скорости туннелирования в двойной КТ с сохранением и с переворотом спина [46]. Иными словами, частота периодического поля ω, равная зеемановскому расщеплению (или меньше его), является самой малой частотой в системе. Параметр адиабатичности (1.19) может и не быть порядка или больше единицы при выполнении одного лишь условия (2.98), поскольку амплитуда периодического поля может быть достаточно большой. Тем интереснее сравнить такой режим «медленной» эволюции с предсказаниями LZSM теории в (1.18) при однократном прохождении уровней.

Модель для изучения динамики в обсуждаемом случае выбиралось такой же, как в предыдущем пункте, за исключением потенциала электрического поля, который вместо (2.86) определялся выражением

$$V(x, t \ge 0) = U_d \cos \omega t f_d(x), \qquad (2.99)$$

т.е. в начальный момент времени он определяет смещение (detuning) $V(x, t=0)=U_d f_d(x)$, а в дальнейшем его амплитуда была равна U_d . Для принятых в предыдущем пункте параметров двойной КТ характерные величины матричных элементов, или скоростей туннелирования с сохранением и переворотом спина в (2.98) составляют γ=1 мкэВ и α=0.5 мкэВ. Для выполнения условия (2.98) мы выбирали магнитное поле $B_z=0.0026 T$, что даёт зеемановское расщепление $\Delta_z=0.2$ мкэВ, обеспечивая выполнение условия (2.98) как на основной гармонике $\omega = \omega_Z$, где $\omega_{Z} = \Delta_{Z} / \hbar$, так и на меньших частотах. Амплитуда смещения (detuning) U_d =-10 мкэВ, что является типичной и относительно небольшой амплитудой в экспериментах [60], [250]. Для отрицательного значения U_d основное состояние отвечает локализации в правой КТ со спином вниз, которое и выбиралось нами как начальное состояние для эволюции. Результаты расчёта вероятности туннелирования (2.88) в левую КТ и спиновых проекций σ_L^z по левой КТ из (2.89) и σ_{Full}^{z} по всей структуре ($\sigma_{Full}^{z} = \sigma_{L}^{z} + \sigma_{R}^{z}$) показаны на рис.2.44 для двух примеров

частоты поля: $\omega = \omega_Z$ и $\omega = \omega_Z/3$. Отметим, что мы получали схожие результаты и для других субгармоник ЭДСР вплоть до $\omega = \omega_Z/8$. На рис.2.44 показана зависимость от времени t/T на 10 периодах электрического поля с начальным условием $\sigma_{Full}^z(0) = -1$ для (а) вероятности туннелирования в левую КТ; (б) *z*проекции спина в левой КТ и (в) полной *z*-проекции спина. Красные кривые (R) отвечают ЭДСР режиму $\omega = \omega_Z$, синие кривые (N) отвечают режиму субгармоники $\omega = \omega_Z/3$. Наблюдается туннелирование с переворотом спина для обоих режимов уже на 1-2 периодах электрического поля, т.е. при 2-4 прохождениях уровней из соседних КТ друг мимо друга, как это показано на рис.1.4. Важным является то, на рис.2.44 туннелирование с достаточно полным переворотом спина наблюдается практически с одинаковой эффективностью как для точного резонанса $\omega = \omega_Z$, так и для его субгармоники $\omega = \omega_Z/3$, причём на совсем небольшом числе периодов электрического поля.

Интересно сопоставить результаты на рис.2.44 с аналитической LZSMоценкой (1.18) при однократном прохождении уровней из правой и левой КТ. Для точного резонанса $\omega = \omega_Z$ и взаимодействия уровней с одинаковой проекцией спина в параметр адиабатичности (1.19) мы для оценки подставляем $\Delta = \gamma$, $v = \omega U_d$, а для переходов с переворотом спина подставляем $\Delta = \alpha$, $v = \omega U_d$. Это приводит к значениям параметров $\delta_{c1} = 0.125$ и $\delta_{f1} = 0.032$ соответственно, а соответствующая вероятность P_{low} остаться на уровне с низшей энергией, т.е. туннелировать в соседнюю КТ, оценивается как (1–*P*), где $P = \exp(-2\pi\delta)$. Для переходов с сохранением спина получаем $P_{low}(\delta_{c1}) = 0.54$, а для туннелирования с переворотом спина получаем $P_{low}(\delta_{c2}) = 0.18$.



Рисунок 2.44. Зависимость от времени средних значений на 10 периодах электрического поля с начальным условием $\sigma_{Full}^{z}(0) = -1$ для (а) вероятности туннелирования P_{L} в левую КТ; (б) *z*-проекции спина σ_{L}^{z} в левой КТ и (в) полной *z*-проекции спина $\sigma_{Full}^{z} = \sigma_{L}^{z} + \sigma_{R}^{z}$. Красные кривые R отвечают ЭДСР режиму $\omega = \omega_{Z}$, синие кривые N отвечают режиму субгармоники $\omega = \omega_{Z}/3$. Наблюдается туннелирование с переворотом спина для обоих режимов [46].

Поскольку в P_L дают вклад оба процесса, то вероятность найти частицы в левой КТ можно оценить как сумму $P_{low}(\delta_{c1})$ и $P_{low}(\delta_{c2})$, что даёт оценку в 0.72, достаточно хорошо согласующуюся с численным значением P_L на красной кривой (R) в момент времени T/2 на рис.2.44(а) после однократного прохождения уровней из правой и левой КТ друг относительно друга. Что касается переходов на частоте поля $\omega = \omega_Z/3$, здесь оценки параметра адиабатичности дают значения $\delta_{c2}=0.375$ и $\delta_{f1}=0.096$ соответственно, откуда вероятности переходов с сохранением и переворотом спина $P_{low}(\delta_{c2})=0.90$ и $P_{low}(\delta_{f2})=0.44$, что тоже хорошо согласуется с данными на рис.244(а) на синей кривой (N) в момент времени t=T/2. Обращает на себя внимание то, что значения параметра адиабатичности δ в рассмотренных примерах лежат в интервале 0.03...0.38, что нельзя отнести к адиабатическому режиму с $\delta > 1$, но нельзя также отнести и к быстрому (диабатическому) режиму с $\delta < 1$ [240], [126]. Мы ориентируемся на условия (2.98) и называем рассмотренные примеры режимом «медленной» эволюции в уже упомянутом смысле, когда частота внешнего поля является самой медленной частотой в задаче.

Подводя итог рассмотренных примеров эволюции, можно сказать, что существуют вполне эквивалентные по эффективности туннелирования и переворота спина режимы динамики как при точном выполнении условия ЭДСР $\omega = \omega_Z$, так и на суб-гармониках ЭДСР при $\omega = \omega_Z/k$, где *k* есть целое число. Это наводит на мысль рассмотреть динамику на субгармониках ЭДСР более подробно, чем мы займёмся в следующем пункте.

2.7.4. Динамика туннелирования и спина на субгармониках ЭДСР

В этом пункте мы подробнее остановимся на режимах эволюции в двойной КТ с СОВ в периодическом поле, рассмотренных в п.2.7.1-2.7.3, для режима ЭДСР и его суб-гармоник (2.95) [154]. Проявления суб-гармоник, или дробных гармоник (undertones) в ЭДСР изучалось в ряде работ как экспериментально [246], [230], так и теоретически [220], [275]. Интерес к возможностям управления спином на субгармониках имеет не только фундаментальное, но и прикладное

значение: условие ЭДСР (2.95) означает, что резонанс возможен не только на основной гармонике $\omega = \omega_Z$, где $\omega_Z = \Delta_Z / \hbar$, но и на субгармониках

$$\omega = \omega_Z / k_3, \tag{2.100}$$

где $k_3=1,2,3,...$ Если зеемановское расщепление настолько велико, что основная гармоника $k_3=1$ имеет слишком высокую частоту, т.е. плохо достижима из-за трудностей с генерацией, то при выполнении условия (2.100) резонанс достижим на меньшей частоте, которая экспериментально доступна. При этом возникает вопрос, в какой степени режимы динамики, которые обсуждались в предыдущих пунктах, сохранятся для субгармоник (2.100).

Перед представлением численных результатов мы опишем аналитический подход в рамках четырёхуровневого приближения, который применялся нашими соавторами ранее в схожих по постановке задачах о динамике джозефсоновских кубитов [227], [228], [195]. Обсудим более подробно структуру переходов в четырёхуровневом приближении, которое показано на рис.2.45.



Рисунок 2.45. Схема нижних четырёх уровней и переходов между ними в двойной КТ. Минимумы КТ смещены на величину detuning U_d , в каждой КТ есть зеемановское расщепление Δ_Z . К правой КТ приложено периодическое поле (двойная зелёная стрелка). Переходы между левой и правой КТ могут идти с сохранением спина со скоростью γ и с переворотом спина со скоростью α . В правой КТ может быть ЭДСР со скоростью β . Начальное и конечное состояние обозначены в правой КТ на уровне 1 (чёрная стрелка) и уровне 2 (красная стрелка) [154].

Из структуры уровней на рис.2.45 можно сделать оценки для максимального числа субгармоник k_{3m} , которые могут наблюдаться в резонансе (2.100) при

фиксированной частоте поля ω в зависимости от зеемановской частоты $\omega_Z = \Delta_Z / \hbar$, т.е. при изменении магнитного поля B_z , а также от амплитуды detuning U_d и периодического поля V_d . Первое неравенство, очевидно следующее из (2.100), имеет вид

$$k_{3m} \le \omega_Z / \omega, \tag{2.101}$$

что отвечает максимальному числу k_{3m} для k_{3m} –фотонного резонанса, которое растёт с ростом зеемановского расщепления. Второе условие, следующее из рис.2.45, определяет минимально необходимую амплитуду поля V_d , необходимую для перехода на уровень в соседней КТ с другой проекцией спина:

$$|U_d| + \Delta_Z \le V_d. \tag{2.102}$$

Условие (2.102) ограничивает Δ_Z сверху при данных параметрах (U_d , V_d) и вместе с (2.101) также ограничивает максимальное число наблюдаемых субгармоник ЭДСР. В экспериментах [246] наблюдалось до восьма таких субгармоник.

Динамику для уровней на рис.2.45 можно рассматривать в базисе, состоящем из функций, локализованных в уединённой левой и правой КТ с проекциями спина на направление B_z вверх и вниз, которые мы расположим в порядке $|R\downarrow>$, $|R\uparrow>$, $|L\downarrow>$, $|L\uparrow>$ с энергиями $E_1,...,E_4$ соответственно. Начальное состояние находится на уровне E_1 и отвечает функции $|R\downarrow>$. Конечное состояние может содержать вклады от всех четырёх базисных функций, но нас интересует проекция спина в правой КТ, в которую вклад дают состояния $|R\downarrow>$, $|R\uparrow>$. В отсутствии левой КТ у нас была бы классическая двухуровневая система с матричным элементом β от СОВ между состояниями $|R\downarrow>$, $|R\uparrow>$, обеспечивающим ЭДСР. Теперь же у нас есть ещё левая КТ и система состоит из четырёх уровней. Туннелирование в левую КТ и обратно, как мы увидим, играет значительную роль в реализации переворота спина в правой КТ, поскольку матричные элементы γ , а для туннелирования, как правило, по модулю значительно превосходят матричный элемент β для связи уровней в правой КТ через СОВ.

Обратимся к построению модельного гамильтониана для эволюции в четырёхуровневой системе на рис.2.45. Учёт всех описанных механизмов в самом

простом приближении приводит к следующей матричной форме гамильтониана в базисе $|R\downarrow>$, $|L\downarrow>$, $|L\downarrow>$, $|L\uparrow>$:

где *h.c.* обозначает эрмитово сопряжение. Типичные значения параметров в (2.101) следующие: $\gamma=1$ мкэВ, $\alpha=0.45\gamma$, $\beta=i\beta_0$ с $\beta_0=0.1\alpha$. Далее решается уравнение эволюции с гамильтонианом (2.103) для вектора состояния ($C_1(t)$, $C_2(t)$, $C_3(t)$, $C_4(t)$), зная который, мы находим вероятность туннелирования в левую КТ $P_L(t)=|C_3(t)|^2+|C_4(t)|^2$ и проекцию спина в правой КТ

$$\sigma_z^{R}(t) = |C_2(t)|^2 - |C_1(t)|^2.$$
(2.104)

Эволюция с гамильтонианом (2.103) рассматривается в представлении взаимодействия [227], [228], [195] при наличии малого параметра $\lambda = \gamma/\Delta_Z <<1$. Такая же малость справедлива и для отношений α/Δ_Z и β/Δ_Z . Напомним кратко этапы проводимого расчёта. Гамильтониан разбивается на два слагаемых $H=H_0+H_1$, где H_0 содержит диагональные слагаемы, а H_1 – недиагональные. Конструируется оператор эволюции $U_0 = \exp \left(\frac{1}{\mu_0 t}/\hbar\right)$ и строится волновая функция ψ_I в представлении $\psi = U_0 \psi_I$. Для функции ψ_I получается новое нестационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом $H_{1I}=U_0^+H_1U_0$. Далее выполняется преобразование к ещё одному представлению ψ_{II} для волновой

функции:
$$\psi_I = U_{1I} \psi_{II}$$
, где оператор $U_{1I}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H_{1I}(\tau) d\tau\right)$. Волновая функция

 ψ_{II} удовлетворяет нестационарному уравнению Шрёдингера с гамильтонианом H_{2I} , который с точностью до членов порядка λ^2 есть $U_{1I}^{+}H_{1I}U_{1I} - i U_{1I}^{+}\hbar\partial U_{1I}/\partial t$. Матричные элементы оператора H_{2I} вычисляются в предположении близости

конкретного кратного значения $k_3\omega$ частоты поля ω к зеемановской частоте ω_Z , т.е. разность

$$\delta_z = \omega_z - k_3 \omega \tag{2.105}$$

предполагается малой по сравнению со всеми другими частотами задачи, т.е. используется приближение вращающейся волны, или RWA-приближение [12], [13], [37]. При этом предполагается, чтобы остальные два резонансных условия (2.93) и (2.94) не выполнялись. Выполняя ещё одну замену $\psi_{II} = U_{\delta}\psi_{III}$, где U_{δ} =diag(exp($-i\delta_z t/2$), exp($i\delta_z t/2$), exp($-i\delta_z t/2$), мы получаем, что ψ_{III} подчиняется нестационарному уравнению Шрёдингера с гамильтонианом

$$H_{RWA} = \begin{vmatrix} h_{11} - \frac{\delta_z}{2} & h_{21}^* & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} + \frac{\delta_z}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h_{22} - \frac{\delta_z}{2} & -h_{21}^* \\ 0 & 0 & -h_{21} & -h_{11} + \frac{\delta_z}{2} \end{vmatrix},$$
(2.106)

где

$$h_{11} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k^2 \left(\frac{V_d}{\hbar \omega} \right) \left[\frac{\gamma^2}{U_d + k\hbar \omega} - \frac{\alpha^2}{\Delta_Z - U_d + \hbar k\omega} \right] - \frac{\beta^2}{\Delta_Z},$$

$$h_{22} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k^2 \left(\frac{V_d}{\hbar \omega} \right) \left[\frac{\gamma^2}{U_d + k\hbar \omega} + \frac{\alpha^2}{\Delta_Z + U_d + \hbar k\omega} \right] + \frac{\beta^2}{\Delta_Z}$$

$$h_{21} = i^{k_3} \frac{\alpha \gamma}{2} \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k^2 \left(\frac{V_d}{\hbar \omega} \right) \left[\frac{J_{k+k_3}(V_d / \hbar \omega) + J_{k-k_3}(V_d / \hbar \omega)}{U_d + k\hbar \omega} + \frac{J_{k+k_3}(V_d / \hbar \omega)}{\Delta_Z + U_d + \hbar k\omega} - \frac{J_{k-k_3}(V_d / \hbar \omega)}{\Delta_Z - U_d - \hbar k\omega} \right].$$

$$(2.107)$$

В (2.107) $J_k(x)$ есть функция Бесселя порядка k. Решение нестационарного уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (2.106) ищется с начальным условием (1, 0, 0, 0) в приближении $k_3\hbar\omega=\Delta_Z$ в (2.107), т.е. при $\delta_z=0$. Мы хотим увидеть резонанс на различных субгармониках, т.е. при различных значениях магнитного поля при выполнении условия (2.100), поэтому мы выполняем суммирование по

*k*₃. В результате получаем итоговое выражение для проекции спина в правой КТ, которое описывает субгармоники ЭДСР:

$$\sigma_z^R(B_z,\omega) = -1 + \sum_{k_3} \frac{\gamma_{k_3}^2}{\gamma_{k_3}^2 + (\Delta_z^{k_3} - \Delta_z)^2},$$
(2.108)

где

$$\begin{cases} \Delta_{z}^{k_{3}} = k_{3}\omega - \frac{2\beta^{2}}{k_{3}\omega} + \alpha^{2}\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{J_{k+k_{3}}^{2}(V_{d}/\hbar\omega) - J_{k-k_{3}}^{2}(V_{d}/\hbar\omega)}{U_{d} + k\hbar\omega}, \\ \gamma_{k_{3}}^{2} = 2\alpha\gamma\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_{k}(V_{d}/\hbar\omega) \frac{J_{k+k_{3}}(V_{d}/\hbar\omega) + J_{k-k_{3}}(V_{d}/\hbar\omega)}{U_{d} + k\hbar\omega}. \end{cases}$$
(2.109)

Представляет интерес сравнение аналитического приближения (2.108) с данными численного расчёта в плоскости (Δ_Z , ω) или (B_z , f), где f есть линейная частота электрического поля. На рис.2.46 показаны карты усреднённых по времени значений проекции спина σ_z^R (2.92) в плоскости (B_z , f). Параметры системы те же, что в п.2.7.2 и 2.7.3,смещение минимумов КТ U_d =–25 мкэВ, амплитуда периодического поля V_d =75 мкэВ. Панель (а) отвечает численному расчёту, панель (b) – аналитическому приближению (2.108). Общая картина семейств светлых линий, отвечающих максимумам σ_z^R при перевороте спина, на рис.2.46 такое же, как и на рис.2.39(b). Субгармоники ЭДСР на панели (а) рис.2.46, отвечающие условию (2.95) или (2.100), обозначены красными цифрами с их номерами k_3 . Горизонтальные красные линии (A), (B) на панели (a) отвечают рассматриваемым ниже примерам эволюции без эффективного туннелирования (линия (A)), а также режиму туннелирования с сохранением спина в рамках условия (2.93) (линия (B)).

Сравнивая численные и аналитические результаты на панелях (a) и (b) рис.2.46, нельзя не отметить хорошее соответствие аналитического приближения (2.108) данным численного расчёта практически на всей плоскости параметров. Это тем более удивительно, что приближение (2.108) получено в рамках малости отстройки частоты δ_z из (2.105) от точного резонансного условия (2.95), т.е. оно



Рисунок 2.46. (а) Численный расчёт и (b) аналитическое приближение (2.108) для σ_z^R из (2.92) в плоскости (B_z , f). Смещение минимумов КТ U_d =-25 мкэВ, амплитуда поля V_d =75 мкэВ. Строение светлых линий такое же, как и на рис.2.39(b). Субгармоники ЭДСР на (а) отвечают условию (2.95) или (2.100) и обозначены их номерами k_3 . Горизонтальные красные линии (A), (B) на (а) отвечают рассматриваемым ниже примерам эволюции без эффективного туннелирования (линия (A)) и на частоте при туннелировании с сохранением спина в рамках условия (2.93) (линия (B)) [154].

обосновано, строго говоря, лишь в окрестности семейства линий, отвечающих субгармоникам, которые пронумерованы на панели (а) рис.2.46. Тем не менее, приближение (2.108) показывает хорошее соответствие и вдали от этих линий, и даже воспроизводит остальные два семейства линий (2.93), (2.94), хотя оно получено вдали от этих резонансов.

Обращает на себя сильная зависимость интенсивности субгармоник ЭДСР, т.е. максимумов в (2.108), от параметров туннелирования γ и $\alpha \sim \gamma$. С физической точки зрения это отвечает возросшей роли СОВ при туннелировании, когда электрон или дырка преодолевают значительное расстояние между двумя КТ и тем самым через механизм СОВ эффективно воздействуют на спин. Мы уже встречались c подобной зависимостью В п.2.7.2., когда слабое даже туннелирование существенно модифицировало зависимость частоты переворота спина ОТ амплитуды поля. Представляет интерес исследовать влияние возрастающей скорости туннелирования на субгармоники ЭДСР более подробно. На рис.2.47 показаны полученные численно значения проекции спина (2.92) в правой КТ для фиксированной частоты поля в плоскости (B_z , γ). Панель (a) отвечает линии (A) на рис.2.46(а) для частоты f=2.5 ГГц, когда эффективного туннелирования нет, а панель (b) построена для частоты f=2.05 ГГц, когда гармоники ЭДСР перекрываются с горизонтальной линией (2.93), что отвечает линии (В) на рис.2.46(а). Номера субгармоник ЭДСР (2.95) отмечены красными цифрами внизу каждой панели. Можно видеть, что с ростом скорости туннелирования у ширина и интенсивность субгармоник растёт, что согласуется с аналитическим приближением (2.108). Горизонтальные линии у1=2.2 мкэВ и $\gamma_2 = 2\gamma_1$ отмечают на рис.2.47 типичные значения параметров туннелирования, которые будут использоваться в обсуждаемых ниже примерах эволюции.



Рисунок 2.47. Проекция спина (2.92) в плоскости (B_z , γ) для частоты поля: (a) *f*=2.5 ГГц, для линии (A) на рис.2.46(a), когда эффективного туннелирования нет; (b) *f*=2.05 ГГц, для линии (B) на рис.2.46(a) с эффективным туннелированием. Номера субгармоник (2.95) отмечены красными цифрами внизу. С ростом γ ширина и интенсивность субгармоник растёт. Линии γ_1 =2.2 мкэВ и γ_2 =2 γ_1 отмечают типичные значения для обсуждаемых ниже примеров эволюции. Гармоника №3 на (b) отвечает структуре уровней с Δ_Z =| U_d | на вставке, где переворот спина и туннелирование идут одинаково интенсивно [154].

Обращает на себя внимание очень интенсивная и уширенная субгармоника №3 на панели (b) рис.2.47. Она отвечает реализованному при данном значении B_z соотношению параметров с $\Delta_Z = |U_d|$, при котором уровень №2 в правой КТ совпадает с уровнем №3 в левой КТ, как это показано на вставке на панели (b) рис.2.47. При такой конфигурации уровней одинаково интенсивно происходят переходы с уровня E_1 на уровень E_2 (переворот спина без туннелирования) и с уровня E_1 на уровень E_3 (туннелирование без переворота спина). Комбинация этих процессов приводит к сложной структуре субгармоники №3 на рис.2.47(b), сильно зависящей от скорости туннелирования γ . Из рис.2.47 можно сделать вывод, что переворот спина в правой КТ на субгармониках ЭДСР сильно зависит от параметров туннелирования в соседнюю левую КТ, которая играет роль усилителя в спиновой динамике.

Мы переходим к обсуждению примеров эволюции для некоторых точек в пространстве параметров системы, прежде всего, к её субгармоникам ЭДСР в рамках условия (2.95). В отличие от п.2.7.2 мы будем интересоваться динамикой спина в правой КТ, т.е. рассматривать эволюцию спинового вектора

$$\vec{S}^{R}(t_{n}) = \left(\sigma_{x}^{R}(t_{n}), \quad \sigma_{y}^{R}(t_{n}), \quad \sigma_{z}^{R}(t_{n})\right)$$
(2.110)

в стробоскопические моменты времени $t_n = nT$, где $\sigma_z^R(t)$ определена в (2.90), а остальные проекции спина вычисляются аналогично с соответствующей матрицей Паули. Мы рассмотрим эволюцию на 200 периодах электрического поля для первых 9 субгармоник «чистого» ЭДСР, которому отвечает линия (А) при f=2.5 ГГц на рис.2.46(а), а также эволюцию на первых 10 субгармониках «гибридного» ЭДСР с эффективным туннелированием, которому отвечает линия (B) на рис.2.46 при f=2.05 ГГц. Начальное положение спина отвечает южному полюсу сферы Блоха. Ha рис.2.48(а), (c), (e) показаны примеры стробоскопической эволюции спинового вектора (2.110) для основной гармоники $k_3=1$ и субгармоник $k_3=2$, 9. Вращение спина происходит как на основной, так и на субгармониках, на панелях (а), (с), (е) доминирующей является плоскость вращения (S_v, S_z).



Рисунок 2.48. Примеры стробоскопической эволюции спинового вектора (2.110) для (а) основной гармоники $k_3=1$ и (с), (е) субгармоник $k_3=2$, 9 для «чистого» ЭДСР на линии (А) на рис.2.46. (b), (d), (f) то же при наличии фазового сдвига $\pi/2k_3$ в электрическом поле (2.111), что приводит к повороту плоскости вращения спина на $\pi/2$. Также на (а), (b) показаны результаты для СОВ Рашбы с той же амплитудой 3 мэВ·нм (зелёная кривая) и комбинированного СОВ Дрессельхауза и Рашбы (красная кривая) [154].

204

Также на панелях (a), (b) рис.2.48 показаны результаты стробоскопической эволюции спина для двух других случаев. В первом из них СОВ определяется слагаемым Рашбы с той же амплитудой 3 мэВ·нм (зелёная кривая), а во втором имеется комбинированное СОВ, содержащие вклады Дрессельхауза и Рашбы с такой же амплитудой (красная кривая). Можно сделать вывод, что вид траектории во всех случаях примерно одинаковый, а поворот спина на π наиболее близок к большому кругу на сфере Блоха при наличии слагаемого Дрессельхауза, которое и является базовым в нашей системе.

Если же мы хотим получить стробоскопическое вращение спина в другой плоскости, то, например, поворот плоскости вращения на $\pi/2$ вокруг направления магнитного поля (ось *z*) может быть достигнут для гармоники k_3 при добавлении фазы $\pi/(2k_3)$ во временную зависимость электрического поля,

$$F(t) = e\mathcal{E}\sin(\omega t + \pi/(2k_3)).$$
(2.111)

Динамика спина с фазой (2.111) электрического поля показана на панелях (b), (d), (f) рис.2.48, которые демонстрируют возможность поворота плоскости вращения спина. Фазовый сдвиг в (2.111) обусловлен тем, что частота ω_Z ларморовской прецессии вокруг направления магнитного поля при фиксированной частоте электрического поля ω растёт линейно с ростом B_z , т.е. согласно (2.95) или (2.100) она же растёт линейно с ростом номера k_3 субгармоники. Что касается самой ларморовской прецессии, то она, разумеется, имеет место, однако на рис.2.48, где эволюция построена в стробоскопические моменты времени $t_n = nT$, эта быстрая прецессия не видна. Наиболее ценным результатом на рис.2.48 является принципиальная возможность переворота спина не только на основной гармонике $k_3=1$, но и на высоких субгармониках $k_3>1$, что также следует из аналитического приближения (2.108). Вращения спина на рис.2.48 носят относительно простой характер, поскольку эффективное туннелирование для этого случая «чистого» ЭДСР отсутствует, т.е. вклад уровней из соседней КТ невелик. Если же мы (2.93)пространстве находимся на линии В параметров, на которой туннелирование эффективно, как это имеет место на линии (B) рис.2.46(a), то динамика спина существенно усложняется.



Рисунок 2.49. Примеры стробоскопической эволюции спинового вектора (2.110) для (а) основной гармоники $k_3=1$ и (b), (c), (d) субгармоник $k_3=2$, 3, 10 для «гибридного» ЭДСР на линии (B) на рис.2.46 [154].

На рис.2.49 показана стробоскопическая эволюция спина на основной гармонике $k_3=1$ и на субгармониках $k_3=2$, 3 и 10 при f=2.05 ГГц без сдвига фазы из (2.111). Можно видеть, что динамика спина существенно усложнилась при равноправном

206

участии всех четырёх уровней в туннелировании и перевороте спина на «гибридном» резонансе и его субгармониках. Переворот спина по-прежнему достигается, однако теперь он не всегда полный.

Динамика спина, показанная на рис.48 и 2.49, ставит вопрос об эффективности переворота спина на разных субгармониках и для разных параметров системы, в первую очередь, для различных значений скорости туннелирования у. Эффективность переворота спина можно оценить двумя характеристиками: глубиной переворота $\sigma_{Z max}^{R}$ и обратным временем переворота спина $T/\tau_{\rm f}$, где T есть период электрического поля. Чем σ_Z^R ближе к единице (напомним, что начальное состояние отвечает значению $\sigma_{Z}^{R} = -1$) и чем больше значение $T/\tau_{\rm f}$, тем эффективнее проходит переворот спина. На рис.2.50 показаны результаты в зависимости от номера субгармоники N_h для (a), (b) $\sigma_{Z max}^R$ и (c), (d) *T*/τ_f для «чистого» ЭДСР на линии (A) на рис.2.46(a) (панели (a), (c)) и для «гибридного» ЭДСР на линии (В) на рис.2.46(а) (панели (b), (d)). На каждой панели рис.2.50 приведено два набора результатов, отвечающие двум линиям γ_{1,2} на рис.2.47. На панелях рис.2.50 кружки, соединённые сплошной линией, скорости туннелирования $\gamma_1 = 2.18$ значению мкэВ. отвечают a ромбы, соединённые пунктирной линией, отвечают значению $\gamma_2 = 2\gamma_1$. Анализируя результаты на рис.2.50, можно видеть, что рост туннельной связи между КТ, т.е. рост параметра у, ускоряет переворот спина. Особенно сильный эффект наблюдается при возрастании скорости переворота спина $T/\tau_{\rm f}$, на основной гармонике и первой субгармонике на панели (с) для «чистого» ЭДСР, что отмечено цифрами (1) и (2). На вставке к панели (с) показана зависимость $\ln T/\tau_f$ от отношения γ/γ_1 , которая близка к линейной, т.е. зависимость T/τ_f от отношения γ/γ_1 близка к экспоненциальной. Таким образом, для ускорения переворота спина наличие туннельной связи с соседней КТ является эффективным способом достижения результата.



Рисунок 2.50. Эффективность переворота спина как функция номера субгармоники N_h (a), (c) на частоте *f*=2.5 ГГц и (b), (d) на частоте *f*=2.05 ГГц. Панели (a), (b) показывают глубину переворота спина $\sigma_{Z\,max}^{R}$, панели (c), (d) показывают скорость переворота спина *T*/ τ_f . Сплошные линии и кружки отвечают скорости туннелирования γ_1 =2.18 мкэВ, штриховые линии и ромбы отвечают γ_2 =2 γ_1 . Рост туннельной связи между точками ускоряет переворот спина. Зависимость ln *T*/ τ_f от γ/γ_1 для гармоники №1 и субгармоники №2 (вставка на панели (c)) близка к линейной, что говорит об экспоненциальной зависимости *T*/ τ_f от γ/γ_1 [154].

Подводя итог исследования динамики спина на основной гармонике и субгармониках ЭДСР в двойной КТ со СОВ, можно сказать, что влияние туннелирования на ускорение переворота спина устойчиво проявляется как в численных расчётах, так и в рамках аналитического приближения (2.108), что позволяет рассчитывать на него в экспериментальных и технологических приложениях. Дополнительный подбор фазы (2.111) переменного поля помогает осуществлять поворот плоскости вращения спина, что важно для реализация операций квантовых вычислений на всей сфере Блоха [70].

Выводы по главе 2

Рассмотренные в главе 2 диссертации задачи о связанной динамике координатных и спиновых степеней свободы электронов и дырок в квантовых точках со СОВ, помещённых в постоянное магнитное и нестационарное электрическое поле, позволяют сделать ряд выводов.

Во-первых, влияние пространственного движения на динамику спина в присутствии СОВ, может иметь различный эффект. Именно, пространственная эволюция с переходами между соответствующими состояниями может играть как деструктивный характер, снижая частоту переворота спина, как это наблюдалось в п.2.3, так и ускорять переворот спина, как это было показано в п.2.7.

Во-вторых, для управления спином можно применять нестационарное электрическое поле с различной зависимостью от времени, как импульсной в п.2.2, так и периодической как в п.2.3, 2.4, 2.6, 2.7. При использовании импульсов со специальной формой сигнала, как в п.2.5, подобранной методами квантовой теории оптимального управления, время переворота спина может быть существенно сокращено.

В-третьих, сама по себе эволюция в многоуровневой системе может иметь весьма сложный характер и демонстрировать черты нерегулярной динамики, как это было показано в п.2.4. Больше того, нерегулярность динамики может нарушить одно из главных проявлений СОВ в виде жёсткой связи координаты и импульса, что проявляется в ослаблении корреляций распределения зарядовой и спиновой плотности в квантовом биллиарде со СОВ.

В-четвёртых, результаты задач об ионизации электрона из КТ в состояния континуума претерпевают изменения в присутствии СОВ. Это проявляется, в частности, в том, что наличие СОВ, обеспечивая более тесную связь состояний с различной проекцией спина на направление магнитного поля, замедляет покидание области КТ, усиливая действие потенциала конфайнмента, что необходимо учитывать при расчёте времени ионизации и сравнении с существующими аналитическими моделями.

В-пятых, явление ЭДСР в двойной КТ протекает с более интересными особенностями по сравнению с одиночной КТ в силу более богатого пространства параметров системы. В частности, туннельная связь с соседней КТ ускоряет переворот спина не только на основной гармонике, но и на субгармониках ЭДСР. Кроме того, дополнительным подбором фазы переменного поля можно осуществлять поворот плоскости вращения спина, что важно для реализация операций квантовых вычислений на всей сфере Блоха. Эти результаты позволяют рассчитывать на реализацию механизма управления спином в данной КТ в достаточно широком диапазоне частот и амплитуд электрического поля.

ГЛАВА 3

ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ СВЕРХРЕШЁТКИ СО СОВ, СТРУКТУРА С МОНОСЛОЕМ ВІ НА SI И СТРУКТУРА С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ И МОНОСЛОЕМ МАГНИТНЫХ ПРИМЕСЕЙ

Квантовые состояния и транспорт в двумерном электронном газе со СОВ, в котором имеется дополнительная периодическая структура типа сверхрешётки, например, образованная периодической модуляцией амплитуды COB, рассматривались в ряде работ в начале 2000-х годов [256], [257], [255], [157]. Позднее схожие задачи рассматривались в сверхрешётках графена с периодически модулированной щелью [185] и в кольце с угловой периодичностью параметра СОВ [28]. В упомянутых работах 2002-2005 г основное внимание уделялось транспортным свойствам и сравнительно мало обсуждалась спиновая плотность в координатном пространстве на периоде сверхрешётки, так И спиновая поляризация в зоне Бриллюэна сверхрешётки. Между тем комбинация влияния СОВ и неоднородного в пространстве потенциала может производить весьма нетривиальные эффекты в строении волновой функции и в результирующей структуре спиновой поляризации, профили которой в координатном пространстве ещё называют спиновыми текстурами. Подобные задачи исследовались в эти же годы в нанопроволоках со СОВ [194], [192], [115], [78], [258], о чём кратко рассказано в п.1.3 первой главы диссертации. Это послужило мотивацией для нас рассмотреть ряд задач с потенциалом сверхрешётки, созданным полем затвора в двумерном электронном газе со СОВ, обратив особое внимание на спиновую плотность в координатном пространстве и спиновую поляризацию в зоне Бриллюэна сверхрешётки.

К этой же группе задач о зонной структуре и спиновой поляризации в сверхрешётке со СОВ можно отнести ведущийся длительное время поиск новых материалов с очень сильным СОВ, что позволило бы активнее применять их в условиях комнатных температур. Рассмотренные на рубеже 2009-2010 годов задачи о зонной структуре системы с монослоем атомов висмута на подложке из кремния представляют собой пример структуры с гигантским СОВ [109], [102], кратко описанные в п.1.5 главы 1 диссертации. Представляло интерес построить более детальную модель зонной структуры в такой системе и исследовать свойства её спиновой поляризации, а также транспортные характеристики. Необходимо отметить, что в системе Bi/Si нами также предсказано существование топологически защищённых краевых состояний с линейным законом дисперсии, т.е. наличие фазы топологического изолятора, что будет обсуждаться в главе 4 диссертации.

Последней из тем, затрагиваемых в главе 3 диссертации, является задача о кинетике фотолюминесценции в квантовой яме InGaAs/GaAs с монослоем магнитных атомов вблизи КЯ. Для объяснения недавних экспериментов [51], [193] с эффектом «спиновой памяти», кратко описанных в п.1.5 диссертации, необходимо было разработать согласованную кинетическую модель фотолюминесценции с учётом обменного взаимодействия между магнитными моментами носителей в КЯ и монослоем атомов марганца, которая представлена в заключительном параграфе главы 3 диссертации.

Структура третьей главе диссертации следующая. Вначале в п.3.1 рассматриваются задачи о зонной структуре, спиновой плотности и спиновой поляризации в сверхрешётке с вкладом Рашбы от СОВ [82], а также с комбинированными вкладами Рашбы и Дрессельхауза [16]. Далее решаются задачи о формировании структур спиновой плотности в таких системах для различных ситуаций: при рассеивании падающей из полупространства на сверхрешётку плоской волны, поляризованной по спину в п.3.2 [137], при облучении электромагнитным излучением терагерцового диапазона в п.3.3 [138], а также при пропускании постоянного электрического тока в п.3.4 [139]. Результаты работ п.3.1-3.4 обобщены в обзоре [41]. В следующем п.3.5 рассматриваются зонная структура, спиновая поляризация и транспортные свойства в монослое Ві на поверхности кремния [144]. В заключительном п.3.6 рассматривается модель кинетики фотолюминесценции для КЯ InGaAs/GaAs с

монослоем атомов Mn вблизи ямы, обсуждаются механизмы эффекта «спиновой памяти» и проводится сравнение с результатами экспериментов [90].

3.1. Квантовые состояния и спиновая поляризация в сверхрешётках со СОВ 3.1.1. Гамильтониан и волновые функции для сверхрешётки со СОВ Рашбы

Рассмотрим двумерный электронный газ на основе GaAs со COB Рашбы, гамильтониан H_0 которого (1.7), собственные функции-двухкомпонентные спиноры (1.8) и спектр (1.9) обсуждались в главе 1. В отсутствие периодического потенциала гамильтониан имеет вид

$$H_{0} = \frac{\hbar^{2}(k_{x}^{2} + k_{y}^{2})}{2m} + \alpha_{R} (\sigma_{x}k_{y} - \sigma_{y}k_{x}).$$
(3.1)

В (3.1) $m=0.067 m_0$ есть эффективная масса электрона в нижней зоне размерного квантования для двумерного электронного газа, $\alpha_R=50$ мэВ·нм есть амплитуда вклада Рашбы в СОВ. Пусть на двумерный газ наложен дополнительный периодический потенциал, вдоль направления изменения которого мы направим ось *Ох*. Гамильтониан примет вид [82]

$$H = H_0 + V_0 \cos \frac{2\pi x}{a},$$
 (3.2)

где V_0 и *а* есть амплитуда периодического потенциала и период сверхрешётки соответственно. Мы рассмотрим сверхрешётку с периодом *a*=60 нм, что определит масштаб кинетической энергии $\varepsilon_0 = \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ порядка 2 мэВ. Для выбранной амплитуды СОВ Рашбы спиновое расщепление (1.10) $\Delta_{SO} = 2\alpha_R k$ для типичного значения квазиимпульса в сверхрешётке $k \sim 1/a$ составит ~ 1.7 мэВ, т.е. будет одного порядка с кинетической энергией. В этих же пределах 1 - 2 мэВ мы будем выбирать и амплитуду периодического потенциала V_0 .

Прежде всего, нам необходимо выбрать метод поиска собственных значений и собственных функций гамильтониана (3.2). Будем искать её по правилам метода разложения по плоским волнам из стандартной зонной теории, т.е. построим блоховскую волновую функцию $\psi_{\vec{k}}$ в виде разложения по

собственным функциям (1.8) гамильтониана (3.1), но с волновыми векторами \vec{k}_n , включающими вектор \vec{b} обратной решётки:

$$\vec{k}_n = \vec{k} + n\vec{b} = \left(k_x + \frac{2\pi}{a}n, \quad k_y\right).$$
(3.3)

Блоховская волновая функция в *l*-й зоне сверхрешётки будет иметь вид

$$\psi_{l\vec{k}} = \sum_{\lambda n} a_{\lambda n}^{l}(\vec{k}) \frac{e^{ik_{n}\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ \lambda e^{i\theta_{n}(\vec{k})} \end{pmatrix}, \quad \theta_{n}(\vec{k}) = \operatorname{Arg}(k_{y} - ik_{nx}).$$
(3.4)

где $\lambda=\pm 1$. После подстановки (3.4) в стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (3.2) энергетические зоны сверхрешётки $E_l(\vec{k})$ и коэффициенты $a_{\lambda n}^l(\vec{k})$ в разложении (3.4) определяются из стандартной алгебраической задачи на собственные значения и собственные векторы:

$$\sum_{\lambda'n'} \left(\left(E_{n'\lambda'}^R - E_s \right) \delta_{\lambda n\lambda'n'} + V_{nn'}^{\lambda\lambda'} \right) a_{\lambda'n'}^l = 0, \qquad (3.5)$$

где

$$E_{n\lambda}^{R} = \hbar^{2} k_{n}^{2} / 2m + \lambda \alpha_{R} k_{n}$$
(3.6)

с вектором \vec{k}_n из (3.3), а матричные элементы периодического потенциала имеют вид

$$\begin{cases} V_{nn'}^{\lambda\lambda'} = V_0 A_{nn'} \left(1 + \lambda\lambda' e^{i(\theta_n - \theta_{n'})} \right), \\ A_{nn'} = \frac{1}{2} \delta_{n,n'\pm 1}. \end{cases}$$
(3.7)

Различные матричные элементы (3.7) определяют различные особенности зонной структуры в сверхрешётке. Так, элементы $V_{nn'\pm1}^{+-}$ и $V_{nn'\pm1}^{-+}$ связывают между собой состояния с энергией (3.6), принадлежащие различным спиновым ветвям с $\lambda=\pm1$. Они отвечают, как это будет видно ниже, за формирование запрещённых зон в спектре сверхрешётки внутри её зоны Бриллюэна. Элементы вида $V_{nn'\pm1}^{++}$ и $V_{nn'\pm1}^{--}$ отвечают за связь ветвей спектра (3.6) с одинаковым спиновым индексом λ . Такие элементы отвечали бы за открытие запрещённых зон на границе зоны Бриллюэна при $k_x=\pm\pi/a$, однако они, как это видно из (3.7) и (3.4), обращаются в нуль в этих

точках. Далее, при движении вдоль направления оси k_y при $k_y >>\pi/a$ (при этом $k_x \neq \pm \pi/a$) элементы $V_{nn'\pm1}^{+-}$ и $V_{nn'\pm1}^{-+}$ спадают к нулю, в то время как элементы $V_{nn'\pm1}^{++}$ и $V_{nn'\pm1}^{--}$ возрастают.

3.1.2. Спектр, спиновая поляризация в зоне Бриллюэна сверхрешётки и спиновая чётность состояний

Зонный спектр сверхрешётки с гамильтонианом (3.2) для амплитуды периодического потенциала $V_0=1.7$ мэВ показан на рис.3.1 вдоль направлений (а) k_x при $k_y=0$ и (б) k_y при $k_x=0$. Цифры 1 и 2 нумеруют две нижние зоны, отвечающие двум расщеплённым по спину ветвям спектра гамильтониана (3.1), для которых ниже на рис.3.2 показана спиновая поляризация в зоне Бриллюэна. На панели (а) видно, что матричные элементы $V_{nn'\pm 1}^{++}$ и $V_{nn'\pm 1}^{--}$ не открывают щель между СОВрасщеплёнными ветвями в спектре при k=0, а также на краях зоны Бриллюэна при $k_x = \pm \pi/a$ и $k_v = 0$. Как видно на панели (b), спиновое расщепление имеет место лишь при конечных k_v внутри зоны Бриллюэна благодаря ненулевым матричным элементам $V_{nn'\pm 1}^{+-}$ и $V_{nn'\pm 1}^{-+}$. Точка А на панели (b) обозначает область антикроссинга зоны 2 и следующей за ней зоны, вблизи которой, как это будет показано ниже, наблюдаются особенности в картине спиновой поляризации. Мы показываем на рис.3.1 спектр в области $k_{x,y}>0$, поскольку в силу теоремы Крамерса [27] $E(\vec{k},\uparrow) = E(-\vec{k},\downarrow),$ где стрелки условие выполняется обозначают противоположные проекции спина в двух симметричных относительно центра точках зоны Бриллюэна.



Рисунок 3.1. Зонный спектр сверхрешётки с гамильтонианом (3.2) для амплитуды периодического потенциала $V_0=1.7$ мэВ вдоль направлений (а) k_x при $k_y=0$ и (b) k_y при $k_x=0$. Нижние зоны 1 и 2, для которых спиновая поляризация показана на рис.3.2, отмечены стрелками. Точка А на панели (б) обозначает антикроссинг зоны 2 и следующей зоны, вблизи которого наблюдаются особенности у спиновой поляризации [82].

Каждому состоянию (3.4) можно сопоставить спиновую плотность

$$S_{i\bar{k}}(x,y) = \psi_{\bar{k}}^+ \sigma_i \psi_{\bar{k}} \tag{3.8}$$

в определённой точке зоны Бриллюэна сверхрешётки, где i=x,y,z (мы опускаем номер зоны у состояния $\psi_{\vec{k}}$), а также спиновую поляризацию в зоне Бриллюэна

$$\sigma_i(\vec{k}) = \int S_{i\vec{k}}(x, y) dx dy.$$
(3.9)

Для двумерного газа со СОВ Рашбы или Дрессельхауза в отсутствие магнитного поля *z*-компонента спиновой поляризации (3.9) равна нулю, в отличие от *z*-компоненты спиновой плотности (3.8). На рис.3.2 показано распределение спиновых проекций (σ_x , σ_y) из (3.9) для двух нижних зон сверхрешётки, обозначенных цифрами 1 и 2 на рис.3.1. Можно видеть, что структура (σ_x , σ_y) напоминает распределение (1.11) на рис.1.2 для двумерного газа с СОВ Рашбы без периодического потенциала лишь вблизи начала координат. Характер векторного поля (3.9) сильнее всего меняется вблизи границ зоны Бриллюэна $k_x = \pm \pi/a$. Также существенная перестройка структуры поляризации происходит вблизи точки антикроссинга на панели (b), где наблюдается смена направления спинового
вектора (3.9). Схожий эффект наблюдался для спиновой поляризации в нанопроволоках [115].



Рисунок 3.2. Спиновая поляризация (σ_x , σ_y) из (3.9) для двух нижних зон сверхрешётки, обозначенных 1 и 2 на рис.3.1. Вблизи начала координат структура (σ_x , σ_y) напоминает распределение (1.11) для двумерного газ с СОВ Рашбы без периодического потенциала и сильно меняется вблизи границ зоны Бриллюэна $k_x = \pm \pi/a$. Вблизи точки антикроссинга на панели (b) происходит смена направления спинового вектора [82].

Поскольку периодический потенциал в гамильтониане (3.2) обладает пространственной чётностью, т.е. V(x)=V(-x), то в задаче существует дополнительное квантовое число *s*=±1, называемое спиновой чётностью [78]. Оно отвечает оператору спиновой чётности

$$U_x = P_x \sigma_x, \tag{3.10}$$

где P_x есть оператор инверсии координаты x, т.е. $P_x f(x)=f(-x)$. Оператор (3.10) коммутирует с гамильтонианом (3.2). Волновая функция (3.4) может обладать спиновой чётностью в определённых точках зоны Бриллюэна сверхрешётки, которые в нашей задаче располагаются вдоль линий $k_x=0$ и $k_x=\pm \pi/a$. В этих точках компоненты ψ_1 и ψ_2 спинорной волновой функции (3.4) удовлетворяют соотношению

$$\Psi_{(1,2)\vec{k}}(x) = s \,\Psi_{(2,1)\vec{k}}(-x),$$
(3.11)

где $s=\pm 1$ есть спиновая чётность. На рис.3.3 мы показываем пространственную зависимость компонент спинора ψ_1 и ψ_2 для (b) зоны 1 на рис.3.1 и (c) зоны 2 на рис.3.1, показанные совместно с потенциалом сверхрешётки на панели (a). На каждой панели (b), (c) показаны примеры для $k_x=\pi/a$ и $k_y=\pm 0.05 \pi/a$. На панели (b) для зоны 1 сплошная линия отвечает $k_y=0.05 \pi/a$ и значению спиновой чётности s=1, как это видно из строения компонент спинора, которые являются вещественными при $k_x=\pm\pi/a$ и удовлетворяют равенству (3.11) с s=1. Пунктирная линия на панели (b) отвечает $k_y=-0.05 \pi/a$ и спиновой чётности s=-1. На панели (c) представлены аналогичные зависимости для зоны 2 также для $k_x=\pi/a$ и $k_y=\pm 0.05 \pi/a$. Из рис.3.3 можно сделать вывод, что симметрия компонент блоховской спинорной функции (3.4) не повторяет симметрию самого периодического потенциала в силу наличия СОВ, как это уже наблюдалось в квазиодномерной системе с нанопроволокой [194]. Дополнительная симметрия (3.11) приводит к дополнительной симметрии распределения спиновой плотности (3.8) вдоль периода сверхрешётки:

$$S_{x,z}(x) = -S_{x,z}(-x).$$
 (3.12)

 $k_r = \pm \pi/a$ компоненты спинора Поскольку (3.4)на линиях являются вещественными, компоненты S_y спиновой плотности в этих точках зоны Бриллюэна равна нулю. На рис.3.4 показано (а) распределение компонент $S_{x,z}(x)$ и (b), (c) спинового вектора ($S_x(x)$, $S_z(x)$) вдоль периода сверхрешётки для нижней зоны 1 при $k_x = \pi/a$ и различных значений проекции квазиимпульса $k_v = \pm 0.05\pi/a$. Можно видеть, что компоненты спиновой плотности удовлетворяют (3.12), что приводит к формированию своеобразной стоячей волны спиновой плотности на панелях (b), (c) рис.3.4, когда спиновый вектор поворачивается в плоскости (x,z)вдоль периода сверхрешётки (напоминаем, что $S_y \equiv 0$ на линии $k_x = \pi/a$). На рис.3.4 можно видеть, что направление спинового вектора в стоячей волне меняет знак со сменой знака у k_v в силу смены спиновой чётности, как это видно на панели (b) рис.3.3.



Рисунок 3.3. Пространственная зависимость (а) периодического потенциала сверхрешётки и (b), (c) компонент спинора (3.4) ψ_1 и ψ_2 вместе со спиновой чётностью (3.11) для (b) зоны 1 на рис.3.1 и (c) зоны 2 на рис.3.1. Показаны примеры для $k_x = \pi/a$ и $k_y = \pm 0.05 \pi/a$. На (b) для зоны 1 сплошная линия отвечает $k_y=0.05 \pi/a$ и значению спиновой чётности s=1. Пунктирная линия на (b) отвечает $k_y=-0.05 \pi/a$ и спиновой чётности s=-1. На панели (c) представлены аналогичные зависимости для зоны 2 также для $k_x=\pi/a$ и $k_y=\pm 0.05 \pi/a$ [82].

Из рис.3.3 и 3.4 можно сделать вывод, что комбинация СОВ и периодического потенциала с определённой симметрией приводит к формированию состояний также с определённой симметрией прежде всего в распределении спиновой плотности вдоль периода сверхрешётки, что важно для понимания механизмов зарядового и спинового транспорта в таких структурах.



Рисунок 3.4. Пространственное распределение (а) компонент $S_{x,z}(x)$ и (b), (c) спинового вектора $(S_x(x), S_z(x))$ вдоль периода сверхрешётки для нижней зоны 1 при $k_x = \pi/a$ и различных значений проекции квазиимпульса $k_y = \pm 0.05\pi/a$. Компоненты спиновой плотности удовлетворяют (3.12), что приводит к формированию стоячей волны спиновой плотности на панелях (b), (c) вдоль периода сверхрешётки, когда спиновый вектор поворачивается в плоскости (x,z) [82].

3.1.3. Спектр и спиновая поляризация при наличии вкладов Рашбы, Дрессельхауза и периодической модуляции параметра Рашбы

Обратимся к более сложному случаю, когда присутствуют вклады в СОВ от гамильтонианов Рашбы и Дрессельхауза, а периодический потенциал, помимо вклада в потенциальную энергию, даёт вклад и в модуляцию параметра Рашбы. Соответствующий гамильтониан можно записать в виде [16]

$$H = H_0 + H_1,$$
 (3.13)

где слагаемое

$$H_0 = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} + \alpha_R (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta_D (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \qquad (3.14)$$

аналогично (3.1), но содержит вклады как Рашбы, так и Дрессельхауза, а второе слагаемое в (3.13) отвечает влиянию периодического потенциала сверхрешётки:

$$H_1 = V(x) + [\vec{e}_z, \vec{\sigma}] \cdot \left(\alpha_1(x) \vec{k} + \vec{k} \, \alpha_1(x) \right) / 2.$$
(3.15)

Первое слагаемое в (3.15) совпадает с уже знакомым нам по предыдущему пункту потенциалом сверхрешётки, а второе слагаемое описывает периодическую модуляцию параметра Рашбы, где для обеспечения эрмитовости проведена симметризация. Мы используем простые периодические зависимости для V(x) и $\alpha_1(x)$:

$$V(x) = V_0 \cos \frac{2\pi x}{a}, \quad \alpha_1(x) = \alpha_1 \cos \frac{2\pi x}{a}.$$
 (3.16)

Волновая функция стационарных состояний гамильтониана (3.13) строится аналогично (3.4), но с поправкой на наличие в (3.14) вкладов как Рашбы, так и Дрессельхауза, для которых собственные значения (3.14), т.е. ветви закона дисперсии, записываются как

$$E_{\lambda}^{RD}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \sqrt{\left(\alpha_R k_y + \beta_D k_x\right)^2 + \left(\alpha_R k_x + \beta_D k_y\right)^2}, \qquad (3.17)$$

а собственные функции по-прежнему имеют вид (1.8), но с фазой

$$\theta(\vec{k}) = \operatorname{Arg}\left(\left(\alpha_{R}k_{y} + \beta_{D}k_{x}\right) - i\left(\alpha_{R}k_{x} + \beta_{D}k_{y}\right)\right).$$
(3.18)

В присутствии периодического потенциала (3.15) блоховская волновая функция по-прежнему строится в форме (3.4), но с фазой, получаемой из (3.18) прежней заменой (3.3) с $k_x \rightarrow k_x + 2\pi n/a$. Совершенно аналогично предыдущему пункту записывается и решается уравнение на собственные значений и собственные функции.

В чём же различие получаемой зонной структуры в сверхрешётке только со вкладом Рашбы в СОВ, рассмотренного в предыдущем пункте, и случая со вкладом Рашбы и Дрессельхауза с модуляцией параметра Рашбы? На рис.3.5 приведены результаты визуализации спектра для (а) прежнего случая чистого вклада Рашбы с α_R =30 мэВ·нм и амплитудой периодического потенциала в (3.16) V_0 =1.7 мэВ с α_1 =0, а также (б) для совместного присутствия вкладов Рашбы и Дрессельхауза в СОВ в (3.14) с α_R =30 мэВ·нм и β_D =20 мэВ·нм, при этом в (3.16) амплитуда потенциала V_0 =0, зато присутствует второе слагаемое с α_1 =10 мэВ·нм.



Рисунок 3.5. Спектры в сверхрешётке для (а) чистого вклада Рашбы с α_R =30 мэВ·нм и амплитудами в (3.16) V_0 =1.7 мэВ и α_1 =0, а также (б) для α_R =30 мэВ·нм и β_D =20 мэВ·нм, при этом в (3.16) амплитуда потенциала V_0 =0, но присутствует второе слагаемое, отвечающее модуляции параметры Рашбы с α_1 =10 мэВ·нм [16].

Из рис.3.5 можно сделать вывод, что модуляция параметра Рашбы с глубиной $\alpha_1/\alpha_R=1/3$, отвечающей экспериментальным данным [189], приводит к сходной структуре зон в сверхрешётке, как и простой электростатический потенциал с постоянным параметром Рашбы. Различия есть лишь в симметрии законов дисперсии на рис.3.5, поскольку для совместного присутствия вкладов Рашбы и Дрессельхауза отсутствует симметрия $k_{x,y} \rightarrow -k_{x,y}$, а есть лишь симметрия $E(\vec{k},\uparrow) = E(-\vec{k},\downarrow)$. Представляет интерес распределение спиновой поляризации (3.9) в зоне Бриллюэна для нового в этом пункте спектра на рис.3.5(б), которое показано на рис.3.6. для (а) нижней и (б) следующей за ней энергетической зоны.



Рисунок 3.6. Распределение спиновой поляризации (3.9) в зоне Бриллюэна для спектра на рис.3.5(б) в (а) нижней и (б) следующей за ней энергетической зоны [16].

На рис.3.6 видно, что в нижней зоне на панели (а) структура типа вихря сохраняется вблизи центра зоны Бриллюэна, подобно тому как это было на рис.3.2.(а) Что касается спиновой поляризации в следующей зоне на панели (б) рис.3.6, здесь её картина существенно сложнее и не повторяет таковую для рис.3.2(b). Именно, присутствует небольшой центральный вихрь, который окаймляют два вихря с противоположными направлениями вращения, плюс формируются новые вихри у границ зоны Бриллюэна. Таким образом, в зависимости от типа периодического потенциала в (3.15) при одной и той же его

пространственной зависимости (3.16) могут формироваться структуры с весьма различной спиновой поляризацией в зоне Бриллюэна. Эти результаты необходимо учитывать при расчётах зарядового и спинового транспорта в структурах с СОВ и сверхрешёткой, которые будут обсуждаться ниже в данной главе диссертации.

3.2. Спиновые текстуры при рассеивании на сверхрешётке со СОВ

Задачи о спин-зависимом транспорте и рассеивании в присутствии СОВ привлекали значительное внимание в начале 2000-х годов из-за открывающихся возможностей «геометрического» способа спиновой фильтрации. Физические механизмы такой фильтрации могу основываться, например, на том, что состояния с различным спином, в том числе в среде с неоднородной амплитудой СОВ, рассеиваются под разными углами [136], [235] либо проводимость становится спин-зависимой [192], [256], [257], [258], [31]. При этом, как и в упомянутых в предыдущем параграфе задачах зонной теории, не слишком большое внимание уделялось пространственному распределению спиновой плотности при рассеивании на структурах с пространственно различным параметром СОВ. Мы рассмотрим в этом параграфе распределения спиновой плотности, или спиновые текстуры, возникающие при рассеивании на занимающей полупространство x>0 сверхрешётки со СОВ Рашбы, которая обсуждалась в предыдущем параграфе.

Общая схема рассматриваемой задачи показана на рис.3.7. Сверхрешётка со СОВ Рашбы занимает полупространство x>0, а на её границу x=0 падает плоская волна ψ_i , являющаяся комбинацией собственных функцией (1.8) гамильтониана Рашбы с волновым вектором $\vec{k} = (k_x, k_y)$ с $k_x>0$ и энергией (1.9):

$$\psi_{i} = a_{1} \frac{e^{ik_{1x}x + ik_{y}y}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ -e^{i\theta_{1}} \end{pmatrix} + a_{2} \frac{e^{ik_{2x}x + ik_{y}y}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ e^{i\theta_{2}} \end{pmatrix}.$$
(3.19)

В (3.19) при фиксированной энергии E и проекции квазиимпульса k_y , которые являются хорошими квантовыми числами, модуль волнового вектора $k_{1,2}$ и его х-компонента в нижней и верхней зонах различны:

$$k_{1,2} = \sqrt{2mE + (m\alpha_1)^2} \pm m\alpha_1,$$
 (3.20)

$$k_{1,2x} = \sqrt{k_{1,2}^2 - k_y^2} , \qquad (3.21)$$

что иллюстрируется на рис.3.7 стрелками различной длины, идущими к окружности $E_{\lambda}(k_x, k_y) = E_F$. В этом параграфе α_1 обозначает амплитуду СОВ Рашбы в полупространстве x<0. Соответствующие контуры постоянной энергии $E_{\lambda}(k_x, k_y) = E_F$ на рис.3.7 показаны двумя окружностями, где больший радиус отвечает нижней зоне спектра (1.9) с $\lambda = -1$, а меньший радиус отвечает верхней зоне с $\lambda = 1$.



Рисунок 3.7. Схема рассеивания состояния ψ_i из (1.8) с волновым вектором (k_x , k_y) и энергией $E_{\lambda}(k_x, k_y)=E_F$ из (1.9), $\lambda=\pm 1$, налетающего на сверхрешётку со СОВ. Состояния ψ_t и ψ_r обозначают прошедшую и отражённую волну. Энергия *E* и компонента k_y являются хорошими квантовыми числами [137].

Параметры $a_{1,2}$ в (3.19) определяются условиями формирования падающей волны. Поскольку вначале заполняется нижняя зона $\lambda = -1$ и её состояния, обладая большим модулем волнового вектора, распространяются при $k > ma_1$ с большей групповой скоростью, чем состояния в верхней зоне, мы принимаем падающее на границу состояние как состояние нижней ветви спектра с $a_1=1$ и $a_2=0$, хотя учёт примеси состояний верхней ветви также является возможным. Отметим, что падающее состояние (3.19) при $a_1=1$ и $a_2=0$ описывает однородную в пространстве спиновую плотность, поскольку является собственной функцией в однородном пространстве. Геометрия же структуры на рис.3.7 отвечает отсутствию симметрии $x \rightarrow -x$, к тому же состояния в сверхрешётке сами по себе имеют неоднородную спиновую текстуру, как это обсуждалось в предыдущем параграфе. Это позволяет надеяться на формирование неоднородных текстур спиновой плотности при рассеивании на сверхрешётке.

Продолжим описывать задачу рассеивания на рис.3.7. Отражённое состояние ψ_r с $k_x < 0$ будет содержать вклады от обеих ветвей спектра (1.9) с данной *E* и данным k_y , как это видно на рис.3.7. Можно записать его аналогично (3.19) в форме

$$\psi_r = r_1 \frac{e^{-ik_{1x}x + ik_y y}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ -e^{i\theta_1} \end{pmatrix} + r_2 \frac{e^{-ik_{2x}x + ik_y y}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ e^{i\theta_2} \end{pmatrix},$$
(3.22)

где будут присутствовать вклады от обеих ветвей спектра, показанные стрелками на рис.3.7, а коэффициенты $r_{1,2}$ подлежат определению из граничных условий. Наконец, прошедшее состояние ψ_t на рис.3.6 отвечает комбинации состояний в сверхрешётке вида (3.4):

$$\psi_t = \sum_{j=1}^2 c_j \psi(k_{xj}, k_y), \qquad (3.23)$$

где разложение ведётся по состояниям $\psi(k_{xj}, k_y)$ в сверхрешётке вида (3.4), у которых k_y и энергия $E=E_F$ такие же, как в падающем состоянии (3.19), а сумма берётся по двум значениям *x*-компоненты $k_{xj}>0$ по двум спин-расщеплённым зонам сверхрешётки, показанным на рис.3.1(а), для которых

$$E(k_{xj}, k_y) = E_F. \tag{3.24}$$

Коэффициенты $r_{1,2}$ в (3.22) и $c_{1,2}$ в (3.23) определяются из граничных условий непрерывности волновой функции и скорости на границе x=0, получаемых по обычной схеме интегрирования уравнения Шрёдингера по малой области вокруг границы [136]:

$$\begin{cases} \psi |_{x=0-} = \psi |_{x=0+}, \\ v_x \psi |_{x=0-} = v_x \psi |_{x=0+}, \end{cases}$$
(3.25)

где в присутствии СОВ Рашбы операторы скорости

$$v_x = \frac{\partial H}{\partial k_x} = \frac{p_x}{m} - \alpha_R \sigma_y, \qquad v_y = \frac{\partial H}{\partial k_y} = \frac{p_y}{m} + \alpha_R \sigma_x$$
 (3.26)

также содержат вклады от СОВ. Поскольку волновая функция является двухкомпонентной, условия (3.25) задают четыре линейных уравнения на четыре неизвестных коэффициента $r_{1,2}$ и $c_{1,2}$, причём в силу наличия падающей волны (3.19) с заданными коэффициентами $a_1=1$ и $a_2=0$ эта система является неоднородной и имеет единственное решение при любой энергии *E*, попадающей в одну из зон сверхрешётки, а также при вещественных значениях *x*-проекции квазиимпульса (3.21). Если эти условия не выполнены, то прохождения волны внутрь сверхрешётки не наблюдается, что является аналогией явления полного внутреннего отражения, обсуждаемого и для задач транспорта со СОВ в рамках представлений о спиновой оптике [136].

После решения задачи рассеивания встаёт вопрос о вычислении наблюдаемых величин в прошедшей волне. Нас интересует прежде всего распределения спиновой плотности, в которое могут давать вклад все падающие электроны с фиксированной энергией E_F и различными значениями *x*-проекции волнового вектора на полуокружности на рис.3.7 с $k_{Fx}>0$. В этом случае формирующуюся спиновую плотность можно записать в форме

$$S_i(x,y) = \int_{k_{Ex}>0} \psi_t^+ \sigma_i \psi_t \, dk_x dk_y \,. \tag{3.27}$$

На рис.3.8 показана пространственная картина спиновой плотности (3.27) вдоль периодов сверхрешётки x=na, построенная в проекциях с парой компонент (S_x, S_z) и (S_x, S_y) для различных значений энергии Ферми (a) $E_F=10$ мэВ и (b) $E_F=30$ мэВ. Значение параметров Рашбы следующее: в сверхрешётке справа от x=0 $\alpha_2=30$ мэВ·нм, а в полупространстве слева от x=0 $\alpha_1=0.1$ α_2 . Такое соотношение отвечает, например, полупроводнику вида GaAs слева от x=0 и сверхрешётке на основе InAs справа от x=0.



Рисунок 3.8. Пространственная картина спиновой плотности (3.27) вдоль периодов сверхрешётки *x=na*, построенная в проекциях с парой компонент (S_x , S_z) и (S_x , S_y) для различных значений энергии Ферми (а) E_F =10 мэВ и (b) E_F =30 мэВ. Параметр Рашбы в сверхрешётке справа от *x*=0 α_2 =30 мэВ·нм, в полупространстве слева от *x*=0 α_1 =0.1 α_2 [137].

Из рис. 3.8 можно сделать вывод, что при данном соотношении между амплитудами СОВ слева и справа от сверхрешётки формируются текстуры спиновой плотности со всеми ненулевыми компонентами $S_{x,y,z}$ на многих периодах сверхрешётки. Что касается средних значений спиновой поляризации для рассматриваемой задачи, то они удовлетворяют соотношениям

$$\sigma_{x,z} = \int S_{x,z}(x,y) \, dx \, dy = 0 \,, \quad \sigma_y = \int S_y(x,y) \, dx \, dy \neq 0 \,. \tag{3.28}$$

Первое из соотношений (3.28) следует из соображений симметрии. Во-первых, в нашей задаче с начальным спином в падающей волне в плоскости (*xy*) отсутствует какое-либо воздействие на спин, кроме СОВ Рашбы, которое одно не способно вызвать *z*-компоненту спиновой поляризации всего электронного газа. Во-вторых,

суммирование в (3.27) проводится симметрично по состояниям с k_y и – k_y , а сама структура симметрично относительно замены координаты $y \rightarrow -y$. Всё это приводит к тому, что *x*-компонента полной спиновой поляризации будет отсутствовать. Единственной ненулевой компонентой будет *y*-составляющая спина, хотя для локальных распределений спиновой плотности (3.27) на рис.3.8 ненулевыми являются все три компоненты.

Поскольку в структуре на рис.3.7 есть граница при x=0, вблизи неё могут образовываться экспоненциально прижатые таммовские состояния, которые обнаружены и в задачах со сверхрешётками [202], [251], [158]. Приводимые в них результаты свидетельствуют о распространении таких состояний вглубь сверхрешётки на 3 - 7 её периодов, т.е. на 200-400 нм для наших параметров. Поскольку полное число периодов и длина используемых в настоящее время в экспериментах сверхрешёток, как правило, существенно больше этих значений, мы не рассматриваем влияние таммовских состояний, предполагая, что область детектирования спиновой плотности будет располагаться в глубине сверхрешётки на расстоянии, большем того, на котором их влияние ещё существенно.

3.3. Формирование спиновой плотности при воздействии на сверхрешётку электромагнитного излучения терагерцового диапазона

В этом параграфе мы рассмотрим формирование спиновых текстур в сверхрешётке, рассмотренной в двух предыдущих параграфах, в процессе облучения структуры электромагнитным излучением терагерцового диапазона с различной поляризацией. Задачи о взаимодействии электронов и дырок в полупроводниках с сильным СОВ с полем электромагнитной волны имеют давнюю историю и замечательные результаты о фотогальванических эффектов [128], в том числе в терагерцовой области электромагнитного излучения [107], [108], где можно упомянуть циркулярный фотогальванический эффект [113], спин-гальванический эффект [106], [110], генерацию спиновой ориентации [252], зарядовых токов [155] и спиновых токов [273], само определение которых в присутствии СОВ было предметом дискуссий [241]. Некоторые вопросы этой

группы задач были упомянуты в п.1.3 главы 1 диссертации. Нашей целью в этом параграфе является более узкая задача о моделировании спиновых текстур на периоде сверхрешётки, возникающих под действием перпендикулярно падающего на плоскость двумерного газа электромагнитного излучения с различной поляризацией.

Структура с двумерным электронным газом и потенциалом сверхрешётки предполагается такой же, как и в п.3.1 с гамильтонианом (3.1), (3.2), учитывающем СОВ Рашбы. Параметры структуры мы выберем для материала на основе InAs, где константа Рашбы может быть значительно увеличена с помощью поля затвора [118]: эффективная масса электрона *m*=0.036 *m*₀, параметр Рашбы $\alpha_R = 20$ мэВ·нм. Значения периода сверхрешётки и амплитуды потенциала в (3.2) a=60 нм и $V_0=10$ мэВ. Спектр $E(k_x, k_y)$ в такой сверхрешётке показан на рис.3.9, где $-\pi/a \le k_x \le \pi/a$, т.е. k_x изменяется в пределах первой зоны Бриллюэна сверхрешётки, а сходные пределы изменения k_v даны для удобства восприятия. Справа на рис.3.9 показана также энергия ħω кванта электромагнитного поля с частотой 2.43 ТГц, которая отвечает межзонным переходам между двумя группами зон на рис.3.9 с широкой щелью между ними, которые будут рассматриваться в данном параграфе [138]. Пусть теперь на структуру падает нормально к плоскости двумерного газа со сверхрешёткой электромагнитное излучение в плоской волне с вектором электрического поля

$$\vec{E}(t) = \vec{e}E_{\omega}e^{-i\omega t} + c.c.,$$
 (3.29)

где \vec{e} есть вектор поляризации, а +с.с. обозначает добавление комплексно сопряжённого слагаемого. Метод расчёта спиновой плотности в рамках теории линейного отклика [59] кратко обсуждался в п.1.3 главы 1 диссертации. Используя выражения (1.31) и (1.31а), для поля (3.29) мы можем записать спиновую плотность $S_i(x)$ в следующем виде [138]:

$$S_{i}(x) = \frac{\pi e^{2} E_{\omega}^{2}}{\omega^{2}} \int d^{2}k \sum_{jl} \xi_{i}^{jl}(\vec{k}) \bar{e}_{j} e_{l}, \qquad (3.30)$$



Рисунок 3.9. Структура энергетических подзон для одномерной сверхрешётки на основе InAs с параметром Рашбы α =20 мэВ·нм, периодом сверхрешётки a=60 нм и амплитудой периодического потенциала сверхрешётки $V_0=10$ мэВ. Энергия кванта электромагнитного поля $\hbar\omega$ для переходов между подзонами отвечает частоте 2.43 ТГц [138].

где черта обозначает комплексное сопряжение, а компоненты $\xi_i^{jl}(\vec{k})$ определяются выражением, следующим из (1.31):

$$\xi^{ijl}(\vec{k}) = \sum_{c,m,m'} \left(\psi_{m'}^{+} \sigma_{i} \psi_{m} \right) \bar{v}_{m'c}^{j}(\vec{k}) v_{mc}^{l}(\vec{k}) \times \left[\delta \left(\omega_{mc}(\vec{k}) - \omega \right) + \delta \left(\omega_{m'c}(\vec{k}) - \omega \right) \right]$$
(3.31)

Выражение (3.31) отличается от (1.31а) отсутствием интегрирования по пространственным координатам, поскольку (3.30) описывает локальную спиновую плотность на периоде сверхрешётки $0 \le x \le a$. Состояние ψ_m в (3.31) отвечает волновой функции (3.4) в *m*-й энергетической зоне сверхрешётки. Спиновая плотность в (3.30) не зависит от координаты *y*, поскольку структура однородна вдоль этого направления. После интегрирования по всем компонентам волнового вектора k_x обращается в нуль компонента спиновой плотности S_y . Что касается остальных двух компонент S_x , S_z , они могут быть не равны нулю в данной точке x на периоде сверхрешётки, поскольку они всегда отличны от тождественного нуля для любых состояний в сверхрешётке, что обсуждалось в п.3.1. Примеры текстур спиновой плотности (3.30) показаны на рис.3.10 и 3.11 для разных положений уровня Ферми на интервале энергии на рис.3.9 и частоты поля (3.29) $\omega/2\pi=2.43$ ТГц.



Рисунок 3.10. Спиновая поляризация вдоль периода сверхрешётки для различных положений уровня Ферми и для линейной вдоль x и циркулярной σ^+ поляризации излучения с частотой 2.43 ТГц и мощностью I=0.3 Вт/см². Максимальная амплитуда на одном периоде сверхрешётки достигается при любой поляризации для положения уровня Ферми $E_F=8...12$ мэВ в запрещённой зоне между двумя группами подзон [138].

На рис.3.10 показаны текстуры для мощности поля I=0.3 Вт/см² двух поляризаций электрического поля: линейного вдоль *Ох* и циркулярно поляризованного σ^+ , а на

рис.3.11 показаны результаты для *I*=0.9 Вт/см² с линейном поляризацией вдоль *Оу*. Можно видеть, что в обоих случаях формируется спиновая плотность с вектором

$$\vec{S}(x) = (S_x(x), 0, S_z(x)),$$
 (3.32)

распределение которого напоминает стоячие волны спиновой плотности для собственных состояний гамильтониана (3.1) сверхрешётки, которые изучались в п.3.1 и примеры которых показаны на рис.3.4(b),(c).



Рисунок 3.11. То же, что на рис.3.10, для линейной поляризации излучения вдоль *у* и большей мощностью *I*=0.9 Bt/cm² [138].

Из рис.3.10 и 3.11 можно сделать вывод, что максимальная амплитуда спиновой плотности на одном периоде сверхрешётки достигается при любой поляризации для положения уровня Ферми $E_{\rm F}$ =8...12 мэВ в запрещённой зоне между двумя группами подзон на рис.3.9. Для линейно поляризованного по *x* и циркулярного излучения σ^+ (и аналогично для не показанной поляризации σ^-) на рис.3.10 картины спиновой плотности получаются весьма схожими между собой и со структурой стоячих спиновых волн в сверхрешётке на рис.3.4. Причина лежит в доминировании матричного элемента скорости v_x , чувствительного к

неоднородности структуры вдоль направления *x*, вдоль которого и ориентирована сверхрешётка. Что касается рис.3.11, для него для получения соизмеримой по амплитуде спиновой плотности пришлось увеличить в (3.30) в три раза мощность, т.е. квадрат амплитуды поля волны. Причина состоит в том, что вдоль *y* структура однородна, и вызвать переходы с линейно поляризованным по *y* излучением можно благодаря аномальному, пропорциональному *x*-проекции спина слагаемому в операторе скорости v_y в (3.26). По сравнению с обычным вкладом от p_x/m для оператора v_x вклад $\alpha_R \sigma_x$ сам по себе даёт меньший вклад в матричный элемент оператора v_y , что обуславливает меньшую амплитуду спиновой плотности на рис.3.11 в пересчёте на единицу мощности поля волны.

Подводя итог этого параграфа, можно отметить, что стоячие волны спиновой плотности, отвечающие собственным состояниям гамильтониана (3.1), проявляются и в существенно неравновесной ситуации, возникающей при облучении сверхрешётки электромагнитной волной различной поляризации. Известно, что подобные неоднородные волны спиновой плотности могут быть достаточно долгоживущими [206], что должно помочь их детектированию в экспериментах.

3.4. Электрический ток, спиновая поляризация и спиновая плотность в сверхрешётке с СОВ в постоянном электрическом поле

Связь пространственных и спиновых степеней свободы в сверхрешётках со СОВ приводит к естественной гипотезе о формировании спиновой поляризации под действием постоянного электрического поля, которая разрабатывалась начиная с начала 2000-х годов. Известно, что в сверхрешётке только со вкладом Рашбы при наличии электрического поля вдоль направления Ox, вдоль которого сформирована сверхрешётка, в ответ на поле возникает спиновая поляризация всего электронного газа с единственной ненулевой компонентой S_y [157]. Вызывает естественный вопрос зависимость формируемой поляризации и локальной спиновой плотности от отношения амплитуд вкладов α_R/β_D Рашбы и Дрессельхауза, а также от величины электрического поля [139].

Базой для решения задачи будет кинетическое уравнение для стационарной функции распределения $f_m(\vec{k})$ в *m*-й энергетической зоне сверхрешётки, модель которой была описана ранее в параграфе 3.1. Гамильтониан (3.13)-(3.16) включает в себя вклады Рашбы и Дрессельхауза в СОВ, а также периодический потенциал $V_0 \cos(2\pi x/a)$ из (3.16). Мы не вводим в этом параграфе дополнительную периодическую модуляцию параметра Рашбы α₁, как это было в п.3.1.3, поскольку её влияние на формирующиеся зоны не слишком отличается от наличия лишь одного потенциала $V_0 \cos (2\pi x/a)$. Постоянное и однородное электрическое поле $(E_x, 0, 0)$ ориентировано вдоль направления сверхрешётки x. В кинетическом уравнении при таком стационарном и однородном поле останутся только слагаемое с производной в k-пространстве и член столкновений [2]. Мы воспользуемся кинетическим уравнением Больцмана, т.е. квазиклассическим описанием, поскольку электрическое поле предполагается достаточно слабым и соответствующая штарковская частота $\Omega = |e|E_x a/\hbar$ удовлетворяет условию $2\hbar\Omega/\Delta <<1$ ([10]), где $\Delta \sim 20$ мэВ есть масштаб зон сверхрешётки на рис.3.9, между которыми происходят переходы в нашей задаче. Кроме того, будет предполагаться, что температура Т=77 К, что отвечает тепловой энергии $k_B T = 6.6$ мэВ, а частота столкновений v=10¹² с⁻¹, что отвечает уширению уровней *ћ*v=3.9 мэВ. При таких соотношениях использование кинетического уравнения Больцмана представляется оправданным. Запишем кинетическое уравнение в приближении частоты столкновений v [139]:

$$eE_x \frac{\partial f_m(k, E_x)}{\partial k_x} = -\nu \left(f_m(\vec{k}, E_x) - F_m(\vec{k}) \right), \tag{3.33}$$

где $F_m(\vec{k}) = 1/(1 + \exp\{(E_m(\vec{k}) - \mu)/k_BT\})$ есть равновесная функция распределения Ферми в *m*-й зоне сверхрешётки, а µ есть химический потенциал.

Рассмотрим вначале сверхрешётку на основе InAs с фиксированными параметрами Рашбы и Дрессельхауза $\alpha_R=20$ мэВ·нм и $\beta_D=12.5$ мэВ·нм, что отвечает отношению $\alpha_R/\beta_D=1.6$, измеренному в экспериментах [110]. Остальные параметры системы те же, что в предыдущем параграфе: эффективная масса

m=0.036 m_0 , период сверхрешётки a=60 нм, амплитуда периодического потенциала $V_0=10$ мэВ. Положение уровня Ферми в структуре $E_F=10$ мэВ отвечает запрещённой зоне между двумя нижним заполненными зонами и двумя верхними свободными зонами на рис.3.9. После численного решения кинетического уравнения (3.33) и получения функции $f_m(\vec{k}, E_x)$ мы вначале найдём среднее значения электрического тока, т.е. ВАХ сверхрешётки

$$I_{x}(E_{x}) = en \sum_{m,\vec{k}} \langle \psi_{m\vec{k}} | v_{x} | \psi_{m\vec{k}} \rangle f_{m}(\vec{k},E_{x})$$
(3.34)

и спиновые проекции

$$\sigma_i(E_x) = \sum_{m,\vec{k}} \langle \psi_{m\vec{k}} | \sigma_i | \psi_{m\vec{k}} \rangle f_m(\vec{k}, E_x), \qquad (3.35)$$

где оператор скорости $v_i = \partial H / \partial k_i$ содержит вклады от СОВ. Суммирование в (3.34) и (3.35) проводится по всем зонам сверхрешётки и всем компонентам волнового вектора, причём компонента $-\pi/a \le k_x \le \pi/a$ меняется в первой зоне Бриллюэна сверхрешётки. Результаты показаны на рис.3.12 для планарных размеров структуры 1x1 мм² и концентрации двумерного электронного газа $n=10^{12}$ см⁻². Можно видеть, что ВАХ на панели (а) имеет немонотонный характер, типичный для сверхрешёток. Особенно ярко нелинейность ВАХ проявляется начиная с электрического поля, при котором штарковская частота $\Omega = |e|E_x a/\hbar$ становится сравнима с частотой столкновений v [10], что в нашей задаче отвечает электрическому полю $E_x \sim 500$ В/см. Обратимся к зависимости от E_x индуцированных спиновых проекций (3.35) на панели (b) рис.3.12. Компонента σ_z для электрического поля вдоль Ох равна нулю. В присутствии лишь СОВ Рашбы, как известно [157] есть только ненулевая компонента σ_v . При наличии же обоих вкладов Рашбы и Дрессельхауза в СОВ присутствуют обе спиновые проекции σ_x и σ_ν, среднее значение которых на периоде сверхрешётки растёт с увеличением амплитуды электрического поля, как это видно на панели (b) рис.3.12. Отношение амплитуд проекций σ_x/σ_v близко воспроизводит отношений амплитуд вкладов Рашбы и Дрессельхауза $\alpha_R/\beta_D = 1.6$. Таким образом, присутствие обоих компонент σ_x и σ_y, которые могут быть измерены, позволит оценить отношение вкладов

Рашбы и Дрессельхауза в транспортных измерениях, что является полезным дополнением к оптическим методам [110].



Рисунок 3.12. ВАХ (3.34) и спиновые проекции (3.35) как функции электрического поля E_x в сверхрешётке на основе InAs с учётом вкладов Рашбы и Дрессельхауза. ВАХ имеет немонотонный характер, выходя на насыщение при $\Omega \sim v$, где Ω – штарковская частота и v-частота столкновений. При наличии обоих вкладов Рашбы и Дрессельхауза в СОВ присутствуют обе спиновые проекции σ_x и σ_y , среднее значение которых на периоде сверхрешётки растёт с увеличением амплитуды электрического поля [139].

Перейдём к описанию текстур спиновой плотности, возникающих в сверхрешётке под действием постоянного электрического поля. По аналогии с (3.34) и (3.35) индуцированная спиновая плотность может быть записана как

$$S_{i}(x, E_{x}) = \sum_{m, \vec{k}} \psi_{m\vec{k}}^{+} \sigma_{i} \psi_{m\vec{k}} f_{m}(\vec{k}, E_{x}).$$
(3.36)

На рис.3.13 показаны распределения спиновой плотности (3.36) для компонент (а) S_x , (b) S_y и (c) S_z на одном периоде сверхрешётки $0 \le x \le a$ и для интервала электрического поля 0≤ E_x ≤600 В/см. На каждой панели приведены графики для двух предельных случаев СОВ: 1) $\beta_D=0$ (подпись «а»), 2) $\alpha_R=0$ (подпись « β »), 3) $\alpha_R = 20$ мэВ·нм и $\beta_D = 12.5$ мэВ·нм, что отвечает отношению $\alpha_R / \beta_D = 1.6$ на рис.3.13 (подпись «α и β»). В нулевом электрическом поле спиновая плотность (3.36) отсутствует, поскольку она имеет существенно неравновесный характер. На рис.3.13 можно видеть, что изменение относительной величины вкладов Рашбы и Дрессельхауза в СОВ приводит к качественным изменениям в профиле спиновой плотности, которые следуют из изменений структуры спиновой поляризации в зоне Бриллюэна при наличии только одного или обоих вкладов в СОВ, как это можно заметить из сравнения рис.3.2 и рис.3.6. В частности, на панели (а) рис.3.13 наблюдается существенное изменение амплитуды проекции $S_x(x)$, которая имеет максимум для соизмеримых амплитуд α_R/β_D . На панели (b) наблюдается смена знака для проекции $S_{\nu}(x)$ при изменении отношения α_R/β_D . Что касается проекции $S_{z}(x)$ на панели (с) рис.3.13, то она с изменением отношения α_R/β_D меняется незначительно, будучи ограниченной условием нулевого интегрального значения z-проекции поляризации $\sigma_z = \int S_z(x, E_x) dx = 0$, которое следует из отсутствия намагниченности в плоскости, перпендикулярной двумерному газу с СОВ Рашбы и Дрессельхауза, при приложении постоянного электрического поля в этой же плоскости. Остальные компоненты спиновой плотности при наличии обоих вкладов Рашбы и Дрессельхауза дают ненулевые интегралы $\sigma_{x,y} = \int S_{x,y}(x,E_x) dx$, как это видно на рис.3.12. Далее, на рис.3.14 показана зависимость спиновой плотности как функции координаты х в сверхрешётке и как отношения α_R/β_D в поле $E_x=50$ В/см. Точка А на оси α/β отвечает отношению $\alpha_R/\beta_D=1.6$, базовому для сверхрешётки на основе InAs.



Рисунок 3.13. Спиновая плотность $S_x(x)$, $S_y(x)$, $S_z(x)$ на одном периоде сверхрешётки как функция координаты и электрического поля. Изменение величины вкладов Рашбы и Дрессельхауза в СОВ приводит к смене знака для проекций спиновой плотности $S_y(x)$ и к существенному изменению амплитуды проекции $S_x(x)$ [139].



Рисунок 3.14. Спиновая плотность $S_x(x)$, $S_y(x)$, $S_z(x)$ на одном периоде сверхрешётки как функция координаты и отношения α_R/β_D амплитуд вкладов Рашбы и Дрессельхауза. Максимумы $S_x(x)$, $S_y(x)$ наблюдаются в области $\alpha/\beta \sim 1$. Точка А на оси α/β отвечает отношению $\alpha_R/\beta_D=1.6$, базовому для сверхрешётки на основе InAs [139].

Из рис.3.14 можно сделать вывод, что максимумы компонент спиновой плотности $S_x(x)$, $S_y(x)$ наблюдаются в области $\alpha/\beta \sim 1$, когда вклады Рашбы и Дрессельхауза соизмеримы. Физический механизм этого эффекта можно проиллюстрировать на рис.3.15 схематическим изображением спиновой поляризации в зоне Бриллюэна для двух соседних подзон сверхрешётки с номерами N (слева) и N+1 (справа).



Рисунок 3.15. Схематическое изображение спиновой поляризации в зоне Бриллюэна для двух соседних подзон сверхрешётки с номерами N (слева) и N+1 (справа) при (а) наличии только СОВ Рашбы с $\alpha_R \neq 0$ и $\beta_D = 0$ (сплошные линии на стрелках) либо только СОВ Дрессельхауза с $\beta_D \neq 0$ и $\alpha_R = 0$ (пунктирные линии на стрелках) и (b) при наличии обоих вкладов в СОВ с $\alpha_R/\beta_D \sim 1$. На панели (а) высокая симметрия спинового распределения с осью 4-го порядка приводит к тому, что вклады в спиновую плотность (3.36) от симметричных точек в зоне Бриллюэна в значительной степени компенсируются в электрическом поле. На панели (b) при $\alpha_R/\beta_D \sim 1$ симметрия спинового распределения ниже, как и степень компенсации вкладов от различных точек зоны Бриллюэна в спиновую плотность [139].

Панель (а) рис.3.15 отвечает случаю наличия только СОВ Рашбы с $\alpha_R \neq 0$ и $\beta_D = 0$ (сплошные линии на стрелках) либо только СОВ Дрессельхауза с $\beta_D \neq 0$ и $\alpha_R = 0$

(пунктирные линии на стрелках). Высокая симметрия спинового распределения с осью 4-го порядка на этом рисунке приводит к тому, что вклады в спиновую плотность (3.36) от симметричных точек в зоне Бриллюэна в значительной степени компенсируются в электрическом поле (E_x , 0, 0), которое также направлено вдоль оси высокой симметрии. Если же оба вклада в СОВ присутствуют с $a_R \neq 0$ и $\beta_D \neq 0$, то симметрия спинового распределения в зоне Бриллюэна сверхрешётки гораздо ниже, как это показано на панели (b) рис.3.15. Фактически остаётся только симметрия $\vec{\sigma}(\vec{k}) = -\vec{\sigma}(-\vec{k})$, следующая из теоремы Крамерса. Степень несимметричности спинового распределения на панели (b) максимальна при отношении $\alpha_R/\beta_D \sim 1$. В результате компенсация вкладов в различных точках зоны Бриллюэна является значительно меньшей и амплитуды проекций спиновой плотности $S_x(x)$, $S_y(x)$ при $\alpha/\beta \sim 1$ достигают максимума, что мы наблюдаем на рис.3.14.

Подводя итог этого параграфа, можно сделать вывод, что, поскольку амплитудой СОВ Рашбы можно управлять при изменении электрического поля, перпендикулярного плоскости двумерного газа, изменяя отношение вкладов α_R/β_D , это открывает пути управления и конфигурацией спиновой плотности в сверхрешётке, формирующейся при протекании через неё электрического тока.

3.5. Квантовые состояния и спиновая поляризация в решётке из монослоя Ві на подложке Si с гигантским СОВ

Поиск новых материалов с большой величиной СОВ в начале 2000-х годов привёл к наблюдению гигантского спинового расщепления до 200 мэВ в трёхслойной системе из сплава Bi/Ag на Ag и на подложке кремния [101], а затем и для атомов висмута на подложке кремния с ориентацией (111) [121], [122], [109], [102], модель спектра для которой была кратко описана в п.1.4 диссертации. В этом параграфе мы опишем наше обобщение этой модели, развитое в нашей работе [144], сделав акцент на зонную структуру и спиновую поляризацию в зоне

Бриллюэна, а также на протекание электрического тока и индуцированную постоянным электрическим полем спиновую поляризацию.

Основное обобщение модели из работы [102], описанной в п.1.4 диссертации для фазы тримера на рис.1.18(b), состоит в учёте всех семи эквивалентных точек $\overline{\Gamma}^{(0)} \dots \overline{\Gamma}^{(6)}$, соединённых шестью векторами $\overline{G}_1, \dots, \overline{G}_6$ для гексагональной зоны Бриллюэна, показанной на рис.3.16, по сравнению с тремя векторами \overline{G}_1 , \overline{G}_2 , \overline{G}_6 , соединяющими четыре точки $\overline{\Gamma}^{(0)}$, $\overline{\Gamma}^{(1)}$, $\overline{\Gamma}^{(2)}$, $\overline{\Gamma}^{(6)}$ на рис.1.20, которые учитывались в этой работе. Мы считаем, что учёт всех векторов $\overline{G}_1, \dots, \overline{G}_6$ позволяет полнее учесть симметрию решётки и описать состояния в более широкой области зоны Бриллюэна, а не только в окрестности М-точки, как в цитированной работе.



Рисунок 3.16. Гексагональная зона Бриллюэна для электронных состояний Ві на подложке кремния в фазе тримера, показанной на рис.1.18(b). Учитываются семь эквивалентных точек $\overline{\Gamma}^{(0)} \dots \overline{\Gamma}^{(6)}$, соединённых шестью векторами $\overline{G}_1, \dots, \overline{G}_6$ для гексагональной зоны Бриллюэна, по сравнению с тремя векторами $\overline{G}_1, \overline{G}_2, \overline{G}_6$, соединяющими четыре точки $\overline{\Gamma}^{(0)}, \overline{\Gamma}^{(1)}, \overline{\Gamma}^{(2)}, \overline{\Gamma}^{(6)}$ на рис.1.20, которые учитывались в работе [102], что позволяет описать состояния в более широкой области зоны Бриллюэна, а не только в окрестности М-точки. [144].

Основные уравнения (1.34)-(1.37), описанные в п.1.4 диссертации, остаются в силе. Мы решаем стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом, матричные элементы которого записываются в базисе функций

$$\psi_{n\vec{k}} = \psi_{k+\vec{G}_n}, \qquad (3.37)$$

где $\psi_{\vec{k}}$ есть двухкомпонентный спинор (1.8) со спектром (1.9) в рамках модели электронного газа со СОВ Рашбы, а \vec{G}_n есть один из шести векторов обратной решётки, показанных на рис.3.16. Соответственно матрица гамильтониана имеет вид

$$H_{nn'} = H_0(\vec{k} + \vec{G}_n)\delta_{nn'} + V_{nn'}, \qquad (3.38)$$

где блок H_0 по-прежнему определяется в (1.35), а матричные элементы периодического потенциала есть те же блоки (1.36)-(1.37):

$$V_{nn'} = \left\langle \psi_n \middle| \sum_m V_0 \exp\left(i\vec{G}_m \vec{r}\right) \psi_{n'} \right\rangle.$$
(3.39)

В нашей работе индексы *n*, *n*' в (3.38), (3.39) пробегают значения 0...6, учитывая все семь точек $\overline{\Gamma}^{(0)}$... $\overline{\Gamma}^{(6)}$ на рис.3.16. Волновая функция строится в виде линейной комбинации функций (3.37):

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{n} a_{n}(\vec{k}) \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}), \qquad (3.40)$$

где коэффициенты разложения находятся при диагонализации гамильтониана (3.38). Числовые параметры в (3.37) мы выбираем те же, что в работе ([102]), где они, в свою очередь, выбирались для согласования с данными экспериментов ([109]): параметры гексагональной зоны Бриллюэна на рис.3.16 $\overline{\Gamma M} = 5.4$ нм⁻¹, $\overline{\Gamma K} = 6.2$ нм⁻¹, параметры спектра m=0.8 m_0 , $\alpha_R=110$ мэВ·нм, $V_0=300$ мэВ.

Энергетический спектр электронов с гамильтонианом (3.37) показан на рис.3.17 для нижних четырёх зон $E_n(k_x, k_y)$, n=1,...,4. Уровень Ферми согласно данным работы [102] расположен в щели между зонами 2 и 3, где формируется небольшая запрещённая зоны шириной $\Delta_g \sim 0.1$ эВ. Сечения плоскостью $k_y=0$ воспроизводят дисперсионные кривые на рис.1.21 вдоль направления $\overline{\Gamma}^{(0)} - \overline{M} - \overline{\Gamma}^{(1)}$ в зоне Бриллюэна на рис.1.20 или рис.3.16. Симметрия спектра

отражает гексагональную симметрию зоны Бриллюэна, а его структура качественно напоминает картины спектра в сверхрешётках со СОВ на рис.3.5, однако с существенно большими амплитудами по энергии, поскольку параметры зоны Бриллюэна имеют атомные размеры, а не размеры сверхрешётки с большим по сравнению с атомным масштабом периодом. Это же касается и параметра СОВ α_R =110 мэВ·нм,, которое подбирается для соответствия с данными экспериментов и существенно превосходит значения для обычных полупроводников группы GaAs и даже InAs.



Рисунок 3.17. Спектр электронов с гамильтонианом (3.37) для нижних четырёх зон $E_n(k_x, k_y)$, n=1,...,4. Уровень Ферми согласно [102] расположен в щели между зонами 2 и 3, где формируется запрещённая зоны шириной $\Delta_g \sim 0.1$ eV. Сечения плоскостью $k_y=0$ воспроизводят дисперсионные кривые на рис.1.21 вдоль направления $\overline{\Gamma}^{(0)} - \overline{M} - \overline{\Gamma}^{(1)}$ в зоне Бриллюэна на рис.1.20 или рис.3.16 [144].

Наряду со спектром мы традиционно рассматриваем спиновую поляризацию в зоне Бриллюэна $\sigma_i(\vec{k}) = \langle \psi_{\vec{k}} | \sigma_i | \psi_{\vec{k}} \rangle$, *i=x,y*, для конкретной *n*-й зоны, номер которой мы опускаем. Компонента σ_z поляризации равна нулю для

комбинации (3.40) собственных функций гамильтониана $H_0(\vec{k} + \vec{G}_n)$. На рис.3.18 показана спиновая поляризация в двух нижних зонах 1 и 2 спектра на рис.3.17, а на рис.3.19 – в верхних зонах 3 и 4.



Рисунок 3.18. Спиновая поляризация $\sigma_i(\vec{k}) = \langle \psi_{\vec{k}} | \sigma_i | \psi_{\vec{k}} \rangle$ в гексагональной зоне Бриллюэна, граница которой выделена сплошной линией, для двух нижних зон (a) *n*=1 и (б) *n*=2 спектра на рис.3.17 [144].



Рисунок 3.19. То же, что и на рис.3.18, для двух верхних зон (a) *n*=3 и (b) *n*=4 спектра на рис.3.17 [144].

В нижних зонах 1 и 2 на рис.3.18 структура вихря спиновой поляризации, закрученного против и по часовой стрелки, типичная для СОВ Рашбы, прослеживается достаточно отчётливо на значительной площади зоны Бриллюэна, подобно тому как это имело место для спиновой поляризации

сверхрешёток со СОВ Рашбы или Дрессельхауза, показанной на рис.3.2 и рис.3.6. По мере приближения к углам зоны Бриллюэна примесь состояний других зон спектра $H_0(\vec{k} + \vec{G}_n)$ с функциями (3.37) становится всё более значительной, и структура спиновой поляризации усложняется. Это усложнение ещё сильнее проявляется в вышележащих зонах 3 и 4 на рис.3.19.

При отсутствии осевой симметрии и симметрии $x \leftrightarrow y$ в распределении спиновой поляризации на рис.3.18, 3.19 сохраняется, разумеется, обусловленная теоремой Крамерса симметрия $\vec{\sigma}(\vec{k}) = -\vec{\sigma}(-\vec{k})$ в каждой зоне, поэтому в отсутствие внешних воздействий полная спиновая поляризация электронного газа во всей зоне Бриллюэна, в которой заполнены все состояния до Е_F, равна нулю. Представляет поэтому интерес рассчитать ВАХ и индуцированную спиновую поляризацию в присутствии постоянного электрического поля, подобно тому как это было сделано в п.3.4 для двумерного газа в одномерной сверхрешётке со СОВ. Мы вновь воспользуемся кинетическим уравнением Больцмана (3.33) и выражениями (3.34), (3.35) для плотности тока и спиновой поляризации, поскольку рассматриваемые электрические поля достаточно слабые, чтобы не учитывать переходы в другие высоко лежащие зоны. Мы сохраняем прежние параметры энергетического спектра на рис.3.17 с E_F=1.6 eV и электронной концентрацией $n=10^{14}$ см⁻², которую можно оценить исходя из поверхностной концентрации $n_0=10^{15}$ см⁻², атомов Ві на подложке кремния с ориентацией (111) согласно [121], [122]. Мы используем прежнее значение частоты релаксации v=10¹² с⁻¹ в кинетическом уравнении (3.33). Что касается температуры, то мы будем использовать значение Т=293 К, чтобы подчеркнуть возможность генерации спиновой поляризации в структуре с очень большим СОВ даже при комнатной температуре.

Мы будем рассматривать две ориентации вектора постоянного электрического поля в плоскости двумерного газа: (E_x , 0, 0) и (0, E_y , 0), которые подставляем в (3.34) и (3.35). В силу отсутствия симметрии $x \leftrightarrow y$ в гексагональной решётке эти направления поля являются не эквивалентными. Зависимость

плотности тока (3.34) и спиновой поляризации (3.35) от напряжённости поля для таких ориентаций показана на рис.3.20(а) и (b) соответственно. Зависимость от ориентации поля (E_x , 0, 0) показана сплошными линиями, зависимость от поля (0, E_y , 0) показана штриховыми линиями.



Рисунок 3.20. Зависимость (а) плотности тока (3.34) и (b) спиновой поляризации (3.35) для электронного газа в решётке висмута на кремнии от напряжённости поля $E_{x,y}$ с ориентациями $(E_x, 0, 0)$ (сплошные линии) и $(0, E_y, 0)$ (штриховые линии) [144].

Анализ ВАХ на рис.3.20(а) говорит о практически линейном её характере во всём интервале электрического поля. Зависимости $j_x(E_x)$ и $j_y(E_y)$ не совпадают в силу упомянутой несимметричности структуры относительно замены $x \leftrightarrow y$, хотя различие двух ВАХ сравнительно невелико. Гораздо больше между собой

различаются спиновые поляризации $\sigma_m(E_i)$ на рис.3.20(b). Доминирование по амплитуде зависимости $\sigma_{\nu}(E_x)$ представляется естественным, поскольку одно лишь СОВ Рашбы индуцирует в постоянном электрическом поле $(E_x, 0, 0)$, параллельном направлению одномерной сверхрешётки, только компоненту спиновой поляризации оу [157]. В нашем случае, однако, имеется и компонента $\sigma_x(E_x)$, хотя и значительно меньшая по амплитуде. Причина её появления находится в структуре поля спиновой поляризации на рис.3.18, 3.19. Наличие областей с дополнительными, помимо центрального, вихря в структуре поля поляризации вблизи сторон шестиугольника у границ зоны Бриллюэна приводит к появлению ненулевой компоненты $\sigma_x(E_x)$, когда электрическое поле генерирует несимметричную заселённость состояний с проекциями k_x и -k_x. Что касается спиновой поляризации при ориентации поля $(0, E_v, 0)$, показанной на рис.3.20(b) штриховыми линиями, то она обладает тем же свойством доминирования модуля одной проекции $\sigma_x(E_v)$ над другой проекцией $\sigma_v(E_x)$, хотя амплитуды самой поляризации в этом случае значительно слабее. Компонента $\sigma_z(E_{x,v})$ отсутствует, поскольку постоянное электрическое поле в плоскости двумерного газа с СОВ Рашбы её не индуцирует.

Подводя итог, можно сказать, что приведённые на рис.3.17-3.19 спектр и спиновая поляризация двумерного электронного газа в сверхрешётке атомов висмута на кремнии вместе с ВАХ и индуцированной спиновой поляризацией на рис.3.20 говорят о том, что данная структура является ярким представителем сверхрешёток с сильным СОВ и атомными размерами элементарной ячейки. рис.3.20 Предсказанные на транспортные И спиновые характеристики, рассчитанные при комнатной температуре, могут быть измерены экспериментально, что позволит уточнить параметры использованной модели. В главе 4 диссертации мы убедимся, что рассматриваемая структура также допускает существование краевых состояний с линейным законом дисперсии в запрещённой рис.3.17, характеризующихся зоне спектра на ненулевым топологическим инвариантом, отражающим свойства пфаффиана (1.52).

3.6. Модель кинетики фотолюминесценции для квантовой ямы с близко расположенным монослоем марганца: эффект «спиновой памяти»

3.6.1. Схема и результаты экспериментов

Задачи о взаимодействии оптически ориентированных спинов электронов и дырок в полупроводниковых наноструктурах с магнитными моментами атомов, интегрированных в саму структуру либо находящихся в непосредственной близости от неё, имеют давнюю историю, см., например, [203], [197], [23], [162], [51], [170]. Кратко некоторые их них были описаны в п.1.5 главы 1 данной диссертации. В этом параграфе мы рассмотрим конкретную задачу, мотивация которой имела истоки в работе [51], также описанной в п.1.4, см. рис.1.25 и рис.1.26. В этой задаче в КЯ InGaAs/GaAs резидентными носителями были дырки, а на расстоянии d=3-8 нм находился практически моноатомный, или δ-слой атомов марганца, см. рис.1.25. После пропускания через структуру одного (рис.1.26(а)) или двух (рис.1.26(b)) последовательных импульсов лазерного излучения с циркулярной σ^+ или σ^- поляризацией в КЯ появлялись оптически генерированные пары электронов и дырок, которые далее рекомбинировали, испуская излучение фотолюминесценции ($\Phi \Pi$) также с σ^+ или σ^- поляризацией. При этом спины дырок взаимодействовали с магнитными моментами атомов Мп в δ-слое, вызывая в том числе и намагниченность по крайней мере части атомов самого б-слоя. Поскольку релаксация магнитных моментов в б-слое протекает существенно более медленно, на порядок медленнее по сравнению с релаксацией спинов электронов и дырок, то намагниченность в δ-слое «запоминала» свою конфигурацию некоторое время и после прихода второго импульса лазера с противоположной поляризацией, влияя тем самым на генерацию определённых проекций спинов у электронно-дырочных пар. Это влияние снижало степень циркулярной поляризации Р из (1.38), показанную на рис.1.26(с). Подобный механизм «спиновой памяти» был замечен достаточно давно, в частности, в работе [203], где рассматривались ферромагнитные плёнки (Ga, Mn)As. В нашей работе [90], описываемой в этом параграфе, ставилась задача количественного расчёта кинетики фотолюминесценции с упомянутым эффектом «спиновой

памяти», что позволило прояснить роль отдельных механизмов и констант взаимодействия разных спин-зависимых групп носителей (дырки, электроны, магнитные моменты δ -слоя марганца). Кроме того, в рассматриваемой в [90] структуре резидентными носителями в КЯ были электроны, а не дырки, как в [51], что несколько меняло характер процессов. Представляло интерес не только воспроизвести в деталях механизм эффекта «спиновой памяти», но и смоделировать зависимость полученной степени циркулярной поляризации P от расстояния d, на котором располагался δ -слой марганца от КЯ. Эта зависимость была достаточна нетривиальна, поскольку указывала на возрастание, а не на убывание P при переходе от образцов с меньшим d к образцам с большим d.

Схема эксперимента с исследованной в нашей работе [90] структуре показана на рис.3.21, а зонная диаграмма, рассчитанная для напряжённой структуры с КЯ In_{0.16}Ga_{0.84}As/GaAs с шириной КЯ 10 нм в рамках методов, разработанных в [19], [48], вместе с основным переходом e_1-hh_1 на длине волны 0.899 мкм, показана ниже на рис.3.22. Для напряжённой структуры уровни лёгких дырок выталкиваются из КЯ и не участвуют в фотолюминесценции. Справа на панели (а) рис.3.21 показана структура вместе с направлением наблюдаемой фотолюминесценции PL. После слоя нелегированного GaAs на расстоянии d_s=2,4,6,8 нм от КЯ в зависимости от образца располагается δ-слой марганца и далее покровный слой GaAs толщины d_c=40 нм. Также на панели (а) рис.3.21 слева показана, (правая часть рисунка) схема подачи во времени импульсов лазерного излучения интенсивности І⁺, Г с циркулярной поляризацией (левая часть рисунка). Фемтосекундный лазер Ті:Sa испускал импульсы длительностью 0.1 пс на длине волны λ =0.899 мкм перехода e_1 - hh_1 в КЯ (см. рис.3.22). На панели (b) рис.3.21 дана таблица-схема подачи импульсов лазера с различной циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- . На панели (с) показан пример регистрации во времени для спектрального распределения интенсивностей ФЛ с циркулярной поляризацией σ⁺, σ⁻ для образца №4 с *d*_s=8 нм. Слева показана картина ФЛ для моды с σ^+ -поляризацией после двух импульсов лазера с одинаковой σ^+
поляризацией, справа – для моды с σ^- -поляризацией после импульсов с чередующейся σ^+ и σ^- поляризацией.



Рисунок 3.21. (а) Структура с КЯ InGaAs/GaAs с δ-слоем марганца на расстоянии d_s =2,4,6,8 нм от КЯ в зависимости от образца, вместе с направлением наблюдаемой фотолюминесценции PL (правая часть рисунка) и схема подачи во времени импульсов лазерного излучения интенсивности I^+ , I^- с циркулярной поляризацией (левая часть рисунка). (b) Таблица-схема подачи импульсов с различной циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- . (c) Пример регистрации во времени для спектрального распределения интенсивностей ФЛ с циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- для образца №4 с d_s =8 нм. Слева показана картина ФЛ для моды с σ^+ -поляризацией после двух импульсов лазера с одинаковой σ^+ поляризацией, справа – для моды с σ^- -поляризацией после импульсов с чередующейся σ^+ и σ^- поляризацией [90].



Рисунок 3.22. Зонная диаграмма напряжённой структуры с КЯ $In_{0.16}Ga_{0.84}As/GaAs$ шириной 10 нм, рассчитанная с использованием алгоритмов из [19], [48], вместе с основным переходом e_1-hh_1 на длине волны 0.899 мкм. Для напряжённой структуры уровни лёгких дырок выталкиваются из КЯ и не участвуют в фотолюминесценции [90].

Зависимость измеренной интенсивности ФЛ от времени (разрешающая способность камеры 50 пс) с циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- показана на рис.3.23 для образца №4 с расстоянием до δ -слоя марганца $d_s=8$ нм. Панель (а) отвечает последовательности импульсов лазера с одинаковой $\sigma^+ - \sigma^+$ поляризацией, (b)чередующейся $\sigma^+ - \sigma^$ отвечает поляризацией панель импульсов. красными кривыми, Регистрируемая интенсивность **σ**⁺ ФЛ показана а интенсивность σ ΦЛ показана синими кривыми. Штриховые линии отвечают экспоненциальным «хвостам» ФЛ после первого (наачка) импульса, которые необходимо вычесть из интенсивности ФЛ после второго (детектирование) импульса. Наложенные поверх экспериментальных кривых кривые с символами (квадраты и звёздочки для σ^+ и σ^- поляризации соответственно) отвечают численному решению в рамках кинетической модели, обсуждаемой ниже. Зелёная кривая на каждой панели рис.3.23 отвечает измеренному значению модуля степени циркулярной поляризации |Pol| из (1.38). Видно, что на панели (b) рис.3.23 после второго импульса лазера с σ^- поляризацией |*Pol*| значительно отражает эффект «спиновой уменьшается, что памяти» OT длительно сохраняющейся поляризации δ-слоя марганца, моделирование которого является нашей целью в рамках кинетической модели ФЛ, которая будет описана в следующем пункте.



Рисунок 3.23. Зависимость измеренной интенсивности ФЛ от времени (разрешающая способность камеры 50 пс) с циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- для образца №4 с расстоянием до δ -слоя марганца d_s =8 нм. (а) Отклик на последовательность импульсов лазера с одинаковой σ^+ – σ^+ поляризацией; (b) Отклик на последовательность с чередующейся σ^+ – σ^- поляризацией импульсов. Интенсивность σ^+ (σ^-) ФЛ показана красными (синими) кривыми. Наложенные поверх кривые с символами (квадраты и звёздочки для σ^+ и σ^- поляризации соответственно) отвечают численному решению в рамках кинетической модели. Зелёная кривая на (a), (b) отвечает модулю степени циркулярной поляризации |*Pol*| из (1.38). Штриховые линии отвечают экспоненциальным «хвостам» после первого (ритр) импульса. На панели (b) после второго импульса лазера с σ^- поляризацией абсолютная величина степени поляризации ФЛ значительно уменьшается, что отражает эффект «спиновой памяти» от длительно сохраняющейся поляризации δ -слоя марганца [90].

Для сравнения результатов на рис.3.24 построена зависимость от времени для разности поляризации $\Delta P(t)$ от последовательности двух импульсов $\sigma^+ - \sigma^-$, т.е. разность значений, показанных зелёной кривой на рис.3.23(а) и на рис.3.23(b):

$$\Delta P(t) = \operatorname{abs}(|Pol^{\sigma^{+}-\sigma^{+}}(t)| - |Pol^{\sigma^{+}-\sigma^{-}}(t)|).$$
(3.41)

На рис.3.24 можно видеть, что $\Delta P(t)$ максимальна в момент времени *t*~0.55 нс, т.е. сразу после прихода второго лазерного импульса, и достигает значения 60%.

255



Рисунок 3.24. Зависимость от времени для разности поляризации $\Delta P(t)$ из (3.41) для ФЛ после импульсов лазера с различной поляризацией на рис.3.23. $\Delta P(t)$ максимальна при *t*~0.55 нс, сразу после прихода второго импульса. На вставке показана усреднённая за интервал между 0.5 и 0.6 нс поляризация ΔP_a как функция температуры, показывающая высокие (до 40%) значения вплоть до *T*=40 К [90].

Поскольку график на рис.3.24 демонстрирует значительные колебания амплитуды $\Delta P(t)$, мы будем в дальнейшем оперировать усреднённой поляризацией, измеренной по интервалу максимального значения $\Delta P(t)$, т.е. согласно данным рис.3.24 за интервал между 0.5 и 0.6 нс. Мы будем рассматривать величину

$$\Delta P_a = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t_0} \Delta P(t) dt$$
(3.42)

при $t_0=0.5$ нс и $\Delta t_0=0.1$ нс. На вставке к рис.3.24 показана усреднённая поляризация ΔP_a как функция температуры, демонстрирующая высокие (до 40%) значения вплоть до T=40 К. Даже при температуре T=70 К можно наблюдать ненулевые значения ΔP_a , хотя такая температура располагается выше точки Кюри для δ -слоя марганца, равной 30-40 К [21], [270]. Усреднённая разность поляризаций (3.42) позволяет описать отклик целого набора образцов в зависимости от времени задержки Δt между двумя импульсами лазера,

отмеченного на схеме подачи импульсов на рис.3.21(а). В экспериментах исследовались четыре образца, сведения о которых представлены в Таблице 1, а сводные результаты по зависимости (3.42) от Δt для всех образцов представлены на рис.3.25 в виде точек с экспериментальными погрешностями, на которые наложены результаты теоретического моделирования в виде сплошных кривых. Зелёный цвет отвечает образцу №1, синий цвет – образцу №2, красный цвет – образцу №3 и чёрный цвет – образцу №4. На рис.3.25 видно, что ΔP_a ожидаемо спадает с ростом Δt в силу естественных процессов спиновой релаксации и рекомбинации электронов и дырок, которые будут обсуждаться в следующем пункте. Неожиданным результатом на рис.3.25 является то, что максимальная ΔP_a наблюдается для образца №4 с максимальным расстоянием d_s =8 нм от КЯ до δ -слоя Мп, т.е. когда обменное взаимодействие спинов дырок и атомов марганца должно быть ослаблено. Мы относим этот эффект к различной концентрации резидентных электронов в КЯ для разных образцов, который будет обсуждаться в следующем пункте.

Таблица 1. Параметры образцов № 1–4 для экспериментов, результаты по которым для зависимости усреднённой разности поляризаций (3.42) от времени задержки Δt между лазерными импульсами показаны на рис.3.25 [90].

Номер образца	Расстояние <i>d</i> _s от КЯ	Время гашения ФЛ	Время спиновой	
	до б-слоя Mn (нм)	τ (пс)	релаксации	
			электронов $1/\gamma_e$ (пс)	
1	2	22±5	230±20	
2	4	46±5	160±20	
3	6	65±5	270±20	
4	8	85±5	670±20	



Рисунок 3.25. Зависимость разности поляризации ΔP_a из (3.41) от времени задержки Δt между импульсами лазера на рис.3.21(а), измеренная для образцов №1 – №4 с параметрами в таблице 1. Максимальная ΔP_a наблюдается для образца №4 с максимальным расстоянием d_s =8 нм от КЯ до δ-слоя Мп [90].

3.6.2. Кинетическая модель фотолюминесценции и сравнение с результатами экспериментов

Спин-зависимый характер процессов генерации и рекомбинации электронов и дырок в описанной выше системе с учётом взаимодействия с δ -слоем марганца приводит к необходимости решения системы связанных кинетических уравнений для заселённостей спин-зависимых состояний, которая записывалась и решалась в ряде работ для сходных по постановке задач [233], [234]. Мы должны учесть шесть видов концентраций: две для электронов $N_{1,2}^e$ с проекциями спинами $\mp 1/2$ на направление *Oz*, перпендикулярное плоскости КЯ, две для дырок $N_{1,2}^h$ с проекциями спинами $\mp 3/2$, и две для атомов марганца $N_{1,2}^{Mn}$ с проекцией момента $\pm 5/2$. В уравнениях баланса должны быть учтены эффекты генерации электронно-дырочных пар с характерной скоростью *A* при воздействии импульсом лазера с правой ($\sigma_2(t)$) и левой ($\sigma_1(t)$) круговой поляризацией и эффекты рекомбинации таких пар с характерной скоростью *B*. Кроме того, должны учитываться эффекты спиновой релаксации со скоростями $\gamma_{e, h, Mn}$ для спинов электронов, дырок и марганца соответственно, где скорость изменения концентрации пропорциональна γ_i и соответствующей разности концентрации $\Delta N_i = N_i - N_{0i}$ между текущим и равновесным значением. Наконец, должно быть учтено изменение спин-зависимой концентрации дырок из-за взаимодействия со спинами в δ -слое марганца с характерной скоростью *C*, а также обратное воздействие спинов дырок на намагниченность в δ -слое марганца с характерной скоростью *D*. С учётом всех описанных механизмов мы запишем систему кинетических уравнений для эволюции спин-зависимых концентраций в следующем виде:

$$\begin{cases} \frac{dN_{1,2}^{e}}{dt} = A\sigma_{2,1}(t) - B \cdot \min\{N_{1,2}^{e}, N_{2,1}^{h}\} - \gamma_{e}\Delta N_{1,2}^{e} \\ \frac{dN_{1,2}^{h}}{dt} = A\sigma_{1,2}(t) + C \cdot f(N_{1,2}^{h}) \cdot \Delta N_{1,2}^{Mn} - B \cdot \min\{N_{2,1}^{e}, N_{1,2}^{h}\} - \gamma_{h}\Delta N_{1,2}^{h}. \quad (3.43)\\ \frac{dN_{1,2}^{Mn}}{dt} = D \cdot f(N_{1,2}^{Mn})\Delta N_{1,2}^{h} - \gamma_{Mn}\Delta N_{1,2}^{Mn} \end{cases}$$

Для уравнений последней, третьей группы в (3.43), описывающих динамику концентраций спинов марганца с двумя проекциями, выполняется закон сохранения $N_1^{Mn} + N_2^{Mn} = N^{Mn}$, где N^{Mn} есть начальная концентрация той подсистемы атомов марганца в δ-слое, которая участвует в кинетике в рамках модели (3.43). Величина №^М зависит от номера образца и для образца №4 принята нами за единицу концентрации в задаче. Влияние лазерных импульсов круговой поляризации, вызывающих рождение электронно-дырочных пар, обозначено в второй группе уравнений (3.43) как $A\sigma_{1,2}(t)$. Интенсивность первой И фотолюминесценции пропорциональна скорости В и минимальной ИЗ соответствующих концентраций $\{N_{1,2}^{e}, N_{1,2}^{h}\}$, участвующих в ФЛ данной спиновой релаксации пропорциональна $\gamma_i N_i$ поляризации. Скорость для соответствующего сорта носителей. Остальные слагаемые во второй и третьей группе уравнений (3.43) отвечают взаимодействию спинов дырок и магнитных ионов Mn друг с другом со скоростями C и D, которые мы обсудим ниже в этом

пункте. Функция $f(N_{1,2}^{h})$ или $f(N_{1,2}^{Mn})$ описывает канал, в котором возможно изменение соответствующей спин-зависимой концентрации благодаря такому взаимодействию. Так, для производной dN_1^{h}/dt ненулевой вклад возможен, лишь если концентрация N_2^{h} отлична от нуля, т.е. есть дырочные носители с другой проекцией спина, которые могут после переворота спина от взаимодействия со спинами Mn дать вклад в изменение N_1^{h} . В этом случае значение $f(N_{1,2}^{h})=N_2^{h}$, а если концентрация $N_2^{h}=0$, то и $f(N_{1,2}^{h})=0$. Аналогичные правила формулируются и для функции $f(N_{1,2}^{Mn})$. Наличие зависимости от концентраций определённых групп носителей для коэффициентов $f(N_{1,2}^{h, Mn})$ в системе (3.43) делает её нелинейной, что в сочетании с нестационарными вкладами $A\sigma_{1,2}(t)$ от импульсов лазера приводит к необходимости поиска численного решения. Сводка численных значений параметров системы (3.43) для образцов №1 - №4 представлена в таблице 2. Мы обсудим выбранные значения ниже в этом пункте.

Образец	Nº1	N <u>∘</u> 2	N <u></u> 23	Nº4
	(<i>d</i> _s =2 нм)	(<i>d</i> _s =4 нм)	(<i>d</i> _s =6 нм)	(<i>d</i> _s =8 нм)
А – скорость генерации электронно-	0.0128	0.0128	0.0128	0.0128
дырочной пары лазерным импульсом (1/пс)				
В – скорость излучательной рекомбинации	0.0454	0.0212	0.0161	0.0125
электроном и дырок (1/пс)				
$C \cdot f(N^{h}_{1,2 max}) - $ скорость поляризации дырок	0.044	0.044	0.044	0.044
при взаимодействии со спинами Mn (1/пс)				
$D \cdot f(N^{h}_{1,2 max})$ – скорость поляризации Мп при	0.0325	0.0325	0.0325	0.0325
взаимодействии со спинами дырок (1/пс)				
<i>ү</i> _е – скорость спиновой релаксации	0.004348	0.005882	0.003703	0.001493
электронов (1/пс)				
<i>ү_h</i> – скорость спиновой релаксации дырок	0.027	0.027	0.027	0.027
(1/nc)				
<i>ү_{Мn}</i> -скорость спиновой релаксации спинов	0.0002	0.0002	0.0002	0.0002
марганца (1/пс)				

Таблица 2. Параметры образцов № 1–4 для системы кинетических уравнений (3.43) [90].

Обратимся к начальным условиям нашей задачи, которые для системы (3.43) описывают неполяризованный δ-слой марганца, концентрацию N^{Mn} спинов в подсистеме которого, участвующую в динамике, мы примем за единицу

концентрации, а также начальную концентрацию резидентных электронов $N_{1,2}^{e}(0)=N_0/2$ в КЯ в единицах концентрации Мn, при отсутствии начальной концентрации дырок, что приводит к начальным условиям

$$\begin{cases} N_{1,2}^{Mn}(0) = 1/2 \\ N_{1,2}^{e}(0) = N_0/2 \\ N_{1,2}^{h}(0) = 0. \end{cases}$$
(3.44)

Начальная концентрация N_0 электронов в КЯ зависит от образца и будет обсуждаться ниже. Здесь мы укажем, что для образца №4 с максимальным d_s =8 нм она максимальна и составляет ~2.26·10⁻⁴ от N^{Mn} , а для образца №1 с минимальным d_s =2 нм она минимальна, точнее, на порядок меньше. После решения системы кинетических уравнений (3.43) с начальными условиями (3.44) мы находим спин-зависимые концентрации, которые определяют интенсивности ФЛ с поляризацией σ^+ и σ^- :

$$\begin{cases} I_0^{\sigma+} = B \cdot \min\{N_2^e, N_1^h\} \\ I_0^{\sigma-} = B \cdot \min\{N_1^e, N_2^h\}. \end{cases}$$
(3.45)

Поскольку камера-регистратор ФЛ имеет конечную разрешающую способность по времени, усредняя сигнал на масштабе $\Delta t_c \sim 50$ пс, в эксперименте измеряются не сами интенсивности ФЛ (3.45), а результат их аппаратной обработки, который мы представим в виде свёртки с аппаратной функцией камеры K(t), моделируемой гауссовым профилем с шириной Δt_c :

$$I_{\sigma}(t) = \int_{0}^{t} K(t-\tau) I_{0}^{\sigma}(\tau) d\tau, \qquad (3.46)$$

где $\sigma=\sigma^{\pm}$. Итоговые зависимости интенсивности ФЛ (3.46) показаны на рис.3.23 тёмными тонкими линиями с квадратиками (интенсивность $I(\sigma^{+})$) и звёздочками (интенсивность $I(\sigma^{-})$) поверх экспериментальных кривых для образца №4, параметры которого даны в таблице 1. Согласие с данными эксперимента достаточно хорошее. Интенсивности (3.46) определяют поляризацию

$$Pol(t) = \frac{I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-}}{I_{\sigma^+} + I_{\sigma^-}},$$
(3.47)

которая после вычисления разности поляризаций (3.41) и усреднения (3.42) определяют серию значений ΔP_a , отложенных сплошной линией соответствующего цвета на рис.3.25 также поверх экспериментальных значений. Можно видеть, что и здесь соответствие с данными эксперимента для различных образцов и различного времени задержки Δt достаточно хорошее.

Для анализа всех стадий процесса, описываемого системой (3.43), мы построим их графическое изображение в виде заселённостей уровней, показанной на рис.3.26. Можно выделить следующие основные стадии, которым отвечают панели (а)-(j) на рис.3.26:

(a) – Заселённости до прихода первого импульса, когда есть лишь резидентные электроны, не поляризованные по спину;

(b) – Заселённости после первого импульса с поляризацией σ^+ , когда генерируются электроны со спином -1/2 и дырки со спином +3/2;

(c) – По прошествии ~100 пс спины в δ-слое Mn поляризуются от взаимодействия с дырками;

(d) – По истечении ещё ~100 пс происходит спиновая релаксация дырок;

(e) – Происходит излучательная рекомбинация электронов и дырок (первый пик интенсивности на рис.3.23);

(f) – Зависимость интенсивностей (3.46) и поляризации (3.47) от времени в ходе рекомбинации;

(g) – Заселённости после рекомбинации до второго импульса. Обращаем внимание, что поляризация Mn после первого импульса сохраняется, влияя на поляризацию дырок;

(h) – Заселённости через ~100 пс после второго импульса с поляризацией σ^- ;

(i) – Через ~100 пс после стадии (h) происходит спиновая релаксация дырок;

(j) – Финальная излучательная рекомбинация электронов и дырок (второй пик интенсивности на рис.3.23).

262



(a) – prior to pump pulse



(c) - < 100 ps after the pump pulse, Mn is polarized by holes



 (e) – radiative recombination within the radiative lifetime;



 (g) – after recombination is over and prior to probe pulse



relaxation of holes takes place



(b) – pump pulse arrival , the pump pulse polarization here is σ^{+}



(d) \sim 100 ps after pump pulse arrival, spin relaxation of holes takes place;



(f) the σ^+ and σ^- intensities and *Pol* after pump illustrating the recombination process



(h) - < 100 ps after probe pulse arrival, the probe pulse polarization here is σ^-



(j) – radiative recombination within the radiative lifetime;

Рисунок 3.26. Кинетика заселённости уровней, описываемой (3.43) с начальными условиями (3.44). (а) – до прихода первого импульса есть лишь резидентные электроны; (b) – после первого импульса с поляризацией σ^+ генерируются электроны со спином -1/2 и дырки со спином +3/2; (c) После ~100 пс спины в δ-слое Mn поляризуются от взаимодействия с дырками; (d) после ~100 пс происходит спиновая релаксация дырок; (e) излучательная рекомбинация электронов и дырок; (f) зависимость интенсивностей (3.46) и поляризации (3.47) от времени в ходе рекомбинации; (g) заселённости после рекомбинации до второго импульса; (h) Заселённости через ~100 пс после второго импульса с поляризацией σ^- ; (i) Через ~100 пс после второго импульса с поляризацией σ^- ; (i) Через ~100 пс после рекомбинация электронов и дырок [90].



Рисунок 3.27. Динамика концентрации атомов марганца в δ -слое со спином 5/2 (синяя кривая) и -5/2 (зелёная кривая) под действием двух импульсов лазера с (а) одинаковой круговой поляризацией $\sigma^+ - \sigma^-$ и (b) противоположной круговой поляризацией $\sigma^+ - \sigma^-$ [90].

Динамика спин-зависимых концентраций особенно наглядно проявляется для подсистемы спинов марганца, для которой, напомним, выполняется закон сохранения $N_1^{Mn} + N_2^{Mn} = N^{Mn}$. Пример зависимости от времени для $N_{1,2}^{Mn}(t)$ приведён на рис.3.27, где зависимость $N_{1,2}^{Mn}(t)$ для спинов марганца в б-слое с проекцией -5/2 (+5/2) показана зелёной (синей) линией соответственно. Панель (а) отвечает отклику подсистемы марганца на последовательность двух импульсов лазера с одинаковой круговой поляризацией $\sigma^+ - \sigma^+$, а панель (b) отвечает отклику на импульсы с противоположной круговой поляризацией $\sigma^+ - \sigma^-$. На панели (а) видно, что уже после первого импульса подсистема марганца оказывается в значительной степени поляризована, что отвечает достаточно сильному обменному взаимодействию спинов дырок и марганца благодаря первому слагаемому с параметром *D* в третьем уравнении (3.43). Далее начинается процесс релаксации в подсистеме спинов марганца, который по сравнению со временем релаксации дырок является значительно более длительным, характеризуясь временем 1/ү_{мn}=5 нс, что согласуется с данными работы [197]. Второй импульс той же поляризации на панели (а) увеличивает степень поляризации подсистемы марганца, возвращая её практически к тем же значениям, что были после первого Поскольку обменное взаимодействие спинами импульса. co дырок пропорционально поляризации подсистемы марганца, т.е. разности между

амплитудами зелёной и синей кривых на рис.3.27, для панели (а) мы имеем одинаково сильное взаимодействие после каждого из импульсов лазера. Это, в частности, отражается в том, что пики интенсивности ФЛ для этого случая на рис.3.23(а) имеют очень схожую форму. Если же последовательность импульсов лазера имеет противоположную круговую поляризацию, то картина поляризации подсистемы марганца, как это видно на рис.3.27(b), будет иной. По истечении времени Δt после первого импульса происходит некоторая релаксация спинов марганца, а после прихода второго импульса с противоположной поляризацией появляется высокая концентрация дырок с противоположной проекцией спина, что приводит к интенсивной смене знака поляризации и у спинов марганца, т.е. отрицательной производной в зависимости на рис.3.27(b) по сравнению с наклоном кривой до второго импульса. Возможна даже ситуация, при которой спины марганца после окончания второго импульса будут иметь остаточную поляризацию другого знака по сравнению с таковой до второго импульса, как это показано на рис.3.27(b). В любом случае, импульс лазера с противоположной поляризацией приводит к уменьшению модуля соответствующей функции $N_{1,2}^{Mn}$, т.е. к уменьшению доли поляризованных по спину атомов марганца из δ-слоя. Это ослабляет эффект от обменного взаимодействия со спинами дырок, что ослабляет и интенсивность пиков ФЛ на рис.3.23(b).

Мы хотели бы подчеркнуть, что взаимодействие спинов дырок и спинов в подсистеме марганца в δ-слое вблизи КЯ представляется нам существенным, поскольку без него, т.е. в отсутствие δ-слоя марганца, эффект «спиновой памяти», заключающийся В ненулевой разности поляризаций ΔP после двух последовательностей импульсов, отсутствует в эксперименте. При его наличии, т.е. в присутствии членов с постоянными C и D в уравнениях (3.43), отвечающих за взаимодействие спинов дырок и марганца, благодаря более длинному (на порядок) времени релаксации спинов марганца последний сохраняет свою поляризацию уже после прохождения второго импульса. Этот второй импульс с поляризацией σ которому отвечает последовательность поляризаций σ⁺-σ и интенсивностей ФЛ на рис.3.23(b), испытывает «тормозящее» влияние на спины дырок с точки зрения их генерации и сохранения в состоянии с проекцией -3/2, поскольку параллельно какое-то время существуют долгоживущие спины марганца в состоянии с проекцией +5/2, как это видно на начальной стадии после прихода второго импульса на рис.3.27(b). И наоборот, если последовательность импульсов имеет одинаковую поляризацию $\sigma^+-\sigma^+$, то после второго импульса дырки испытывают воздействие от ориентированной подсистемы спинов марганца с той же по знаку проекцией +5/2, которая сохраняется долго, как это видно на рис.3.27(a). Это означает, что влияние спинов марганца снижает эффективность процесса спиновой релаксации для дырок, что приводит к существенно большей степени циркулярной поляризации на рис.3.23(a) по сравнению с результатом на рис.3.23(b).

Фактор ослабления обменного взаимодействия между спинами дырок и марганца с ростом расстояния d_s от δ -слоя до КЯ можно учесть в изменении концентрации N^{Mn} в той подсистеме спинов марганца, которая участвует в моделируемой динамике. Если для какого-то одного образца с расстоянием d_0 между δ -слоем и КЯ мы принимаем значение концентрации N^{Mn} как опорное, то зависимость от d_s можно аппроксимировать экспонентной, обычной для моделирования обменного взаимодействия:

$$N^{Mn}(d_s) = N^{Mn}(d_0) \exp\left(-\frac{d_s - d_0}{d_0}\right).$$
(3.48)

Мы используем в качестве опорных значений данные для образца №4 с d_s =8 нм, т.е. $HM^n(d_0)$ =1 есть единица концентрации в нашей модели. Экспоненциальная аппроксимация (3.48) делает ненужной в рамках принятой в модели точности дополнительное моделирование зависимости параметров *C* и *D* в таблице 2 от номера образца, т.е. от расстояния d_s , хотя, разумеется, более точное моделирование может выявить здесь отличия в значениях этих постоянных. Необходимо отметить, что из всех параметров в таблице 2 именно постоянные *C* и *D* в ведены фактически из соображений соответствия с данными эксперимента и наименее обоснованы, в отличие от остальных констант, которые привязаны к

экспериментально установленным параметрам генерации И гашения фотолюминесценции, а также спиновой релаксации всех компонент в системе (3.43). Обменное взаимодействие проявляется у нас лишь в экспоненциальной зависимости (3.48) от расстояния d_s, но, фактически, весь расчёт постоянных C и D должен производиться исходя из микроскопической модели обменного взаимодействия спинов дырок и δ-слоя марганца. Прямое приложение методов взаимодействия встречает определённые трудности, обменного поскольку расстояние от δ-слоя марганца до дырок в КЯ достаточно велико и достигает 8 нм для образца №4, для которого наблюдаемые эффекты в поляризации самые сильные. Это может потребовать более тонких моделей обмена, в том числе непрямого обмена. В последние годы был развит ряд моделей, в том числе модель непрямого обмена через испускание и поглощение фононов с эллиптической поляризацией [163], [49]. Их развитие может составить интересную задачу микроскопического расчёта параметров обменного взаимодействия, лежащую, однако, за пределами круга вопросов, решаемых в данной диссертации.

Обсудим в заключение этого параграфа роль резидентных электронов в КЯ, которая поможет объяснить экспериментальные зависимости на рис.3.25 для разных образцов №1 - №4. Поскольку исходная подложка GaAs легирована донором, то в КЯ имеются резидентные электроны. На их концентрацию, однако, влияет и присутствие б-слоя марганца, который является акцептором. Именно, чем ближе б-слой марганца к КЯ, т.е. чем меньше расстояние d_s , тем меньше концентрация электронов в КЯ в силу ухода электронов в б-слой марганца. Для образца №4 с максимальным d_s =8 нм концентрация резидентных электронов максимальна и составляет по данным расчёта зонной структуры около 2.26·10⁻⁴ от концентрации подсистемы спинов марганца, участвующих в динамике, а для образца №1 с минимальным d_s =2 нм она минимальна, точнее, на порядок меньше. Это приводит к тому, что для образца №1 с наименьшим d_s наблюдаемая разность поляризаций ΔP минимальна, а для образца №4 с наибольшим d_s она, наоборот, максимальна, хотя слой марганца расположен дальше от КЯ и обменное взаимодействие с дырками для образца №4 слабее. Тем не менее, фактор большей

начальной концентрации резидентных электронов оказывается важнее В обеспечении более яркого эффекта с разностью поляризаций ΔP , что И наблюдается на рис.3.25 как эксперименте, В так И для результатов моделирования.

Выводы по главе 3

В третьей главе был описан ряд систем, позволяющих получить распределения спиновой плотности в координатном пространстве и спиновую поляризацию в *k*-пространстве, используя влияние СОВ, а также была развита модель кинетики фотолюминесценции для структуры с КЯ и δ-слоем магнитных атомов, находящихся на разном расстоянии от неё.

Было обнаружено, сверхрешётке, что В одномерной созданной периодическим электростатическим полем затвора над двумерным электронным газом в полупроводнике, возникает зонная структура, в которой состояния описываются ненулевой спиновой поляризацией в зоне Бриллюэна. Было показано, что состояния В пространственно симметричном потенциале сверхрешётки характеризуются дополнительным квантовым числом, называемым спиновой чётностью.

Показано, ЧТО генерация неоднородной спиновой плотности В координатном пространстве в таких сверхрешётках может быть достигнута в отсутствие внешнего магнитного поля при учёте СОВ, если в гамильтониане есть вклады, нарушающие исходную пространственную симметрию, в том числе при рассеивании на сверхрешётке со СОВ, а также при облучении электромагнитной волной диапазона, отвечающего расстоянию между подзонами в сверхрешётке. Кроме того, показано появление двух компонент спиновой поляризации в плоскости электронного газа в сверхрешётке, в которой СОВ содержит вклады Рашбы и Дрессельхауза. Также показано, что спиновая плотность на периоде сверхрешётке содержит все три ненулевые компоненты, относительная величина которых может меняться при изменении отношения параметров Рашбы и Дрессельхауза.

Рассмотрена структура с гигантским (несколько сотен мэВ) расщеплением зон, обусловленным СОВ, реализуемая в электронном газе в решётке атомов висмута на подложке из кремния ориентации (111). Построено обобщение модели почти свободных электронов, дающее возможность рассчитать зонную структуру и спиновую поляризацию во всей зоне Бриллюэна. Рассчитаны ВАХ и индуцированная постоянным электрическим полем спиновая поляризация в такой структуре, компоненты которой зависят от ориентации электрического поля относительно кристаллографических направлений. Полученные значения электрического тока и спиновой поляризации в силу очень большого СОВ позволяют рассчитывать на их наблюдение при комнатной температуре.

Построена кинетическая модель фотолюминесценции в системе с КЯ InGaAs/GaAs, содержащей монослой (δ-слой) атомов марганца на различном расстоянии от КЯ, в которой резидентными носителями являются электроны. В модели учтено феноменологическим образом обменное взаимодействие спинов дырок в КЯ и спинов марганца. Построенная модель позволила объяснить экспериментально измеренные зависимости интенсивности ФЛ и её поляризации, в том числе эффект «спиновой памяти», заключающийся в долговременном (на масштабе времени спиновой релаксации дырок) существовании наведённой обменным взаимодействием спиновой поляризации марганца. Эта долгоживущая поляризация, в свою очередь, влияет на спиновую ориентацию индуцированных следующим импульсом лазера дырок, создавая упомянутый эффект «спиновой памяти». Полученные результаты позволяют также прояснить роль резидентных электронов в КЯ, от концентрации которых зависят параметры ФЛ, измеренные в экспериментах для образцов с различным расстояниям δ-слоя марганца от КЯ.

ГЛАВА 4 КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ И ДИНАМИКА В ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ С МАГНИТНЫМИ БАРЬЕРАМИ. КРАЕВЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОНОСЛОЕ ВИСМУТА НА КРЕМНИИ

В данной главе диссертации рассматриваются задачи, в которых основным типом структуры, для которой ставится задача, является топологический изолятор (ТИ). Сюда входят задачи о модели квантовых точек (КТ), созданных магнитными барьерами на одномерном крае двумерного ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe, задачи о спектре и признаках ТИ на базе монослоя атомов висмута на кремнии, а также задачи о движении волновых пакетов на поверхности трёхмерного ТИ на базе Bi₂Te₃ с потенциальными барьерами, числе барьерами В том c с намагниченностью.

Краткий литературный обзор некоторых задач о ТИ, в том числе моделей КТ в ТИ, представлен в параграфе 1.6 первой главы диссертации. Рассмотренные в ранних работах модели КТ в ТИ [166], [253], [87], [99] содержали в себе те или иные приближения, связанные прежде всего с непроницаемостью стенок барьеров, между которыми формировались локализованные состояния в КТ. Между тем вопрос о проникновении волновой функции в барьер является одним из центральных при получении модели спектра и квантовых состояний. Это связано с тем, что проникновение краевого состояния в область барьера связано с микроскопической природой его взаимодействия с составляющими барьер атомами. Для создания потенциала конфайнмента для краевых состояний в ТИ с дираковским, линейным законом дисперсии, как известно, простых электростатических барьеров недостаточно в силу эффекта клейновского [133]. туннелирования Поэтому часто рассматривают магнитные макроскопические барьеры в непосредственной близости от края ТИ, для которых, однако, не было разработано микроскопической теории взаимодействия с краевыми состояниями. Опираясь на известную модель взаимодействия краевого состояния с одиночной магнитной примесью в двумерном ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe [167], [168], мы построим обоснование такой модели для барьеров конечной высоты и конечных линейных размеров, которую мы в наших более ранних работах применяли феноменологически.

Структура 4 диссертации следующая. В п.4.1 строится главы микроскопическая модель локализованных состояний В одиночной KT. возникающей при взаимодействии одномерных краевых состояний в двумерном ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe с магнитными барьерами, рассматриваемыми как ансамбль распределённых в конкретной области пространства магнитных моментов [153]. В следующем п.4.2. рассматривается обобщение модели на структуру с двойной КТ, сформированной тремя магнитными барьерами с различной поляризацией [26]. Далее в п.4.3 рассматриваются характеристики релаксации энергии для локализованных состояний в одиночной КТ с учётом состояний континуума, формируемых в присутствии тех же магнитных барьеров, а также с учётом состояний объёмного материала [43]. Далее в п.4.4 оценивается время жизни квазистационарных состояний в КТ в ТИ с магнитными барьерами для более тонких барьеров [151]. Следующие два параграфа посвящены динамическим задачам с КТ в ТИ. В п.4.5 рассматриваются динамика заселённости и спиновой плотности для состояний дискретного спектра в исследуемых КТ в присутствии периодического электрического поля, в том числе при туннелировании в состояния непрерывного спектра в области КТ [44]. Далее в п.4.6 рассматривается задача о широкой КТ в ТИ со многими дискретными уровнями в периодическом электрическом поле, являющаяся аналогом задачи о квантовом биллиарде со СОВ, описанной в п.2.4 главы 2 диссертации [147]. Исследуются проявления нерегулярной динамики, которые, по нашим сведениям, почти не затрагивались в предшествующих работах по ТИ. Следующие два параграфа главы 4 посвящены краевым состояниям в трёхмерных ТИ на базе Bi₂Te₃ или Bi₂Se₃. В п.4.7 рассматривается динамика волновых пакетов, собранных из краевых состояний на поверхности трёхмерного ТИ на базе Bi₂Te₃, в присутствии потенциальных барьеров, как электростатических, так и магнитных, в том числе решается задача рассеивания [45]. Далее в п.4.8

рассматриваются особенности динамики волновых пакетов и магнитопоглощения при учёте гексагонального искажения, или «гофрировки» спектра поверхностных состояний В Bi₂Te₃ [38]. В заключительном 4.9 краевых параграфе рассматривается вопрос о свойствах краевых состояний в электронном газе, находящимся в решётке висмута на подложке кремния, зонная структура которого рассматривалась в п.3.5 главы 3 диссертации. Показано, что в спектре формируются краевые состояния с энергиями в запрещённой зоне объёмного материала, причём зонная структуру в объёме описывается ненулевым Z₂ индексом, что говорит о топологической защищённости краевых состояний [146]. Таким образом, предсказывается существование нового ТИ на базе двумерного электронного газа в монослое висмута на поверхности кремния.

4.1. Модель КТ на крае ТИ в КЯ HgTe/CdTe, образованной макроскопическими магнитными барьерами

4.1.1. Вывод гамильтониана для состояний в КТ с магнитными барьерами

Как было описано в п.1.6.6. главы 1 диссертации, отправной точкой при построении модели взаимодействия краевого состояния в ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe является модель взаимодействия краевого состояния с одиночной магнитной примесью, которая была развита в работах [167], [168]; см. также [179], [183], [94], [186], [156], [100], [264]; о взаимодействии краевых состояний с ядерными спинами см. [124]. В этой модели рассматривается оператор взаимодействия (1.70) краевого состояния в модели ВНZ [57] для ТИ с одиночной магнитной примесью, локализованной в точке (x₀, y₀, z₀) и имеющей спин $\vec{S} = (S_x, S_v, S_z)$. Матрица $V(z_0)$ в базисе модели ВНZ описана в (1.71), где оператор $S_{\pm}=S_x\pm iS_y$, а параметры $J_0,\,J_1,\,J_2,\,J_m$, являющиеся вещественными функциями координаты z₀, определяются профилями компонент огибающей функции в модели ВНZ и описаны в (1.72). В (1.72) функции $f_{1,3}(z_0)$ являются симметричными при $z_0 \rightarrow -z_0$, a функции $f_{24}(z_0)$ замене являются

антисимметричными. Параметры α, β пропорциональны величине обменного взаимодействия между краевым состоянием и магнитной примесью, которая может достигать нескольких десятков мэВ [179], [94], [264]. Вычисляя матричные элементы оператора (1.71) в базисе краевых состояний (1.42), мы получаем эффективный гамильтониан взаимодействия краевого состояния с магнитной примесью в виде (1.73).

Если от одиночных магнитных примесей мы перейдём к макроскопическому магниту, то потребуется усреднение оператора (1.73) по всему объёму магнитного барьера, экспериментальную реализацию которого можно искать, например, в классе диэлектрических магнитов семейства MnSe или EuSe [183], [186]. Для моделирования такого магнита нам потребуются геометрические свойства функций $J_0(z_0)$ и $J_m(z_0)$, входящих в (1.73), поскольку мы будем рассматривать магниты с ориентацией магнитных моментов в плоскости (xy), поэтому слагаемого в (1.73), пропорционального S_z, в нашей модели не будет. Из определения (1.72) мы заключаем, что функция $J_0(z_0)$ является антисимметричной, а функция $J_m(z_0)$ является симметричной относительно замены $z_0 \rightarrow -z_0$. Графики этих функций показаны на рис.4.1(a,b) как функции безразмерной координаты z_0/d для параметров модели BHZ в KЯ HgTe/CdTe толщиной d=7 нм, построенные для параметров $\alpha = \beta = 1$ мэВ в (1.72). Функция F(z) на панели (с), связанная с $J_0(z_0)$, будет введена ниже в (4.8). Можно видеть, что функции J₀ и J_m являются антисимметричной и симметричной соответственно, а их локальные максимумы располагаются вблизи края КЯ при $z_0 = \pm d/2$, причём амплитуда J_m достигает величины нескольких единиц $\alpha(\beta)$.



Рисунок 4.1. Зависимость от координаты z_0/d для (а) симметричной функции $J_0(z_0)$ и (b) антисимметричной функции $J_m(z_0)$ из (1.72) в модели ВНZ для КЯ HgTe/CdTe толщиной d=7 нм при $\alpha=\beta=1$ мэВ. (c) То же для функции F(z)/d, определённой в (4.8) [153].

Перейдём взаимодействия К описанию краевого состояния с макроскопическим магнитом [153], состоящим из ансамбля магнитных моментов пространства $\vec{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$ $\vec{\mu}_n$, расположенных В точках И g-фактором характеризующихся Тогда гамильтониан обменного g_n .

274

взаимодействия такого магнита с краевым состоянием, имеющим спин \vec{s} , может быть записан в виде

$$H_{\text{exch}} = -\frac{\hbar}{2} \vec{J}(\vec{r}) \cdot \vec{s} , \qquad (4.1)$$

где векторный оператор

$$J(\vec{r}) = \frac{1}{\mu_B} \sum_{n} \frac{2}{g_n} V(z_n) J(\vec{r} - \vec{r}_n)$$
(4.2)

включает в себя спиновый оператор $V(z_n)$ из (1.73) и обменный интеграл $J(\vec{r} - \vec{r}_n)$ точке $\vec{r} = (x, y, z)$ и взаимодействия краевого состояния В лля индивидуального магнита в точке $\vec{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$. Мы будем преобразовывать выражение (4.2) при следующих предположениях. Во-первых, мы будем индивидуальных рассматривать ансамбль магнитов, ориентированных В плоскости (*xy*) КЯ, поэтому ориентацию спинового вектора $\vec{S} = (S_x, S_v, S_z)$ в (1.73) для каждого магнитного момента можно параметризовать одним углом θ (см., например, [87]:

$$\begin{cases} S_x = S \cos \theta \\ S_y = S \sin \theta \\ S_z = 0, \end{cases}$$
(4.3)

поэтому слагаемое в (1.73), пропорциональное S_z , исчезает. Во-вторых, мы предполагаем магнитный барьер макроскопическим и содержащим настолько большое число индивидуальных магнитных моментов, что от суммирования в (4.2) мы можем перейти к интегрированию, $\sum_n \rightarrow \int \rho dx dy dz$, где плотность магнитных моментов в пространстве связана с их числом N в параллелепипеде со сторонами L_x , L_y , L_z соотношением $\rho = N/L_x L_y L_z$. В-третьих, мы примем следующую простую аппроксимацию для обменного интеграла $J(\vec{r} - \vec{r}_n)$ в (4.2):

$$J(\vec{r} - \vec{r}_n) = I \exp\left(-\frac{\left|\vec{r} - \vec{r}_n\right|}{a}\right),\tag{4.4}$$

где для магнита, границы которого расположены симметрично относительно плоскости z=0, мы используем аппроксимацию евклидового расстояния $|\vec{r} - \vec{r}_n| = \sqrt{(x - x_n)^2 + (y - y_n)^2 + (z - z_n)^2}$, которая позволяет разделить переменные:

$$\frac{\left|\vec{r} - \vec{r}_{n}\right|}{a} \approx \frac{\left|\vec{r} - \vec{r}_{n}\right|_{1}}{a_{1}} \equiv \frac{\left|x - x_{n}\right| + \left|y - y_{n}\right| + \left|z - z_{n}\right|}{a_{1}},\tag{4.5}$$

где параметр $a_1=1.5a$ подобран нами исходя из максимальной близости двух расстояний в (4.5) в широком интервале [$-100 \ a,...,100 \ a$], который достаточен для наших расчётов. С учётом этих трёх предположений сумма (4.2) переходит в интеграл

$$J(\vec{r}) = \mu \frac{2\rho I}{\mu_B g} \int V(z_n) f(x - x_n) f(y - y_n) f(z - z_n) dx_n dy_n dz_n , \qquad (4.6)$$

где

$$f(x - x_n) = \exp\left(-\frac{|x - x_n|}{a_1}\right)$$
(4.7)

и аналогично для $f(y-y_n)$ и $f(z-z_n)$. Аппроксимация (4.6) позволяет нам разделить усреднение по ансамблю магнитных моментов на усреднение вдоль направления *z* перпендикулярно плоскости КЯ и на усреднение в плоскости (*xy*) КЯ, поскольку обменные параметры (1.72) и спиновый оператор $V(z_n)$ зависят только от координаты $z_0=z_n$ индивидуального магнитного момента.

Рассмотрим вначале усреднение вдоль направления z перпендикулярно плоскости КЯ. Будем считать, что распределение индивидуальных магнитных моментов симметрично относительно плоскости z=0 и постоянно на всей толщине d КЯ. Нас интересует слагаемое в (4.6), пропорциональное антисимметричной функции $J_0(z_n)$ из (1.42), график которой показан на рис.4.1(а). Для неё интеграл по ширине КЯ d имеет вид

$$F(z) = \int_{-d/2}^{d/2} J_0(z_n) e^{-\frac{|z-z_n|}{a_1}} dz_n .$$
(4.8)

График функции (4.8) показан на рис.4.1(с), откуда можно сделать вывод, что функция F(z), как и функция $J_0(z_n)$, является антисимметричной и интеграл от неё по области КЯ равен нулю,

$$\int_{-d/2}^{d/2} F(z) dz = 0.$$
(4.9)

Равенство (4.9) означает, что слагаемое в гамильтониане (1.73), пропорциональное J_0 , после усреднения по ширине КЯ исчезает, не давая вклада в гамильтониан взаимодействия с макроскопическим магнитом. Остаётся только последнее слагаемое, пропорциональное усреднённой функции $J_m(z_n)$. Как мы видели на рис.4.1(b), эта функция является симметричной, поэтому вклад от неё после интегрирования по z_n в (4.6) и последующего усреднения по ширине КЯ не исчезает,

$$\frac{1}{d^2} \int_{-d/2}^{d/2} \int_{-d/2}^{d/2} J_m(z_n) e^{-\frac{|z-z_n|}{a_1}} dz_n dz = \langle J_m \rangle .$$
(4.10)

С учётом (4.9) и (4.10) оператор (1.73) после усреднения вдоль ширины КЯ примет вид, который был ранее введён в наших работах [147], [43] феноменологически:

$$V_m = M(\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta) F(x) F(y), \qquad (4.11)$$

где одинаковые по структуре функции F(x) и F(y)

$$\begin{cases} F(x) = \frac{1}{a_1} \int_{x_1}^{x_2} \exp\left(-\frac{|x - x_n|}{a_1}\right) dx_n \\ F(y) = \frac{1}{a_1} \int_{y_1}^{y_2} \exp\left(-\frac{|y - y_n|}{a_1}\right) dy_n \end{cases}$$
(4.12)

определяют пространственный профиль магнитного барьера вдоль направлений xи y в плоскости КЯ, из которых направление x перпендикулярно краю ТИ, а направление y отвечает протяжённому краю ТИ, вдоль которого распространяются краевые состояния со спектром (1.49).

Рассмотрим одну функцию F(x) из (4.12), поскольку структура второй функции F(y) ей аналогична. Область макроскопического магнита занимает

интервал $[x_1, x_2]$ с длиной $L_x=x_2-x_1$ порядка 100 нм, что значительно больше характерной дистанции обменного взаимодействия a_1 . Интегралы в (4.12) вычисляются аналитически, описывая профиль барьера вдоль направления x следующего вида:

а) В области магнита при $x_1 < x < x_2$

$$F_{\rm in}(x) = \left(2 - \exp\left(-\frac{x - x_1}{a_1}\right) - \exp\left(-\frac{x_2 - x}{a_1}\right)\right); \tag{4.13}$$

б) в области слева от магнита при $x < x_1$

$$F_{\text{left}}(x) = \left(\exp\left(-\frac{x_1 - x}{a_1}\right) - \exp\left(-\frac{x_2 - x}{a_1}\right)\right); \tag{4.14}$$

в) в области справа от магнита при $x > x_2$

$$F_{\text{right}}(x) = \left(\exp\left(-\frac{x-x_2}{a_1}\right) - \exp\left(-\frac{x-x_1}{a_1}\right)\right).$$
(4.15)

Профиль барьера, определяемый (4.13)-(4.15), показан на рис.4.2 для линейного размера магнита $L_x=x_2-x_1=100$ нм и полуторного радиуса обменного взаимодействия $a_1=5$ нм, которое взято достаточно большим для целей иллюстративности.



Рисунок 4.2. Профиль потенциального барьера F(x) из (4.13)-(4.15) для линейного размера $L_x=x_2-x_1=100$ нм и параметра обменного взаимодействия $a_1=5$ нм [153].

На рис.4.2 можно видеть, что профиль весьма близко напоминает комбинацию ступенчатых функций на интервале *x*₂-*x*₁=100 нм, использованных нами

феноменологически в работах [147], [43]. Его приближение комбинацией ступенчатых функций будет тем более адекватным, чем меньше отношение a_1/L_x , поэтому ниже мы будем использовать такое приближение. Для оценки степени взаимодействия краевого состояния с магнитным барьером нам необходимо сравнить глубину *l* проникновения в барьер с параметром обменного взаимодействия a_1 , чем мы займёмся в следующем пункте.

4.1.2. Глубина проникновения краевого состояния в барьер

Мы хотим оценить глубину l проникновения в магнитный барьер, находящийся в непосредственном соприкосновении с краем ТИ, вдоль которого распространяется взаимодействующее с ним состояние. Среди основных кандидатов на роль магнитных барьеров для ТИ выступают диэлектрические магниты семейства MnSe или EuSe [183], [186]. Это означает, что с точки зрения зонной структуры пограничная область макроскопического магнита представляет собой потенциальный барьер. Для безмассовых фермионов Дирака с законом дисперсии (1.49) в базисе (1.42) из модели BHZ наличие барьера может быть описано слагаемым с «массовым» оператором σ_z :

$$H = H_0 + V_0 \sigma_z, \tag{4.16}$$

где параметр $V_0>0$ характеризует высоту барьера на границе ТИмакроскопический магнит, а H_0 есть гамильтониан ВНZ в отсутствие барьера. Поскольку нас интересует зависимость волновой функции от координаты xпоперёк края ТИ в направлении к барьеру, мы можем воспользоваться уравнение на неё в форме (1.43) с дополнительным потенциалом барьера (4.16), а двухкомпонентную волновую функцию по-прежнему можно искать в виде (1.44). Уравнение на её компоненты, обобщающее (1.43), имеет вид [153]

$$\begin{bmatrix} \widetilde{\varepsilon} \left(-id/dx\right)\hat{\mathbf{l}} + \begin{pmatrix} \widetilde{M}(-id/dx) & -iAd/dx \\ -iAd/dx & -\widetilde{M}(-id/dx) \end{pmatrix} + V_0 \sigma_z \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}.$$
(4.17)

После подстановки в (4.17) волновой функции (1.44) мы получаем линейную однородную систему уравнений на коэффициенты α , β , в которую обратная глубина проникновения $\lambda = 1/l$ входит в качестве параметра:

$$\begin{vmatrix} C+M+V_0+\lambda^2(D+B)-E & -iA\lambda \\ -iA\lambda & C-M-V_0+\lambda^2(D-B)-E \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$
(4.18)

Условие существования нетривиального решения для коэффициентов α, β состоит в равенстве нулю определителя системы (4.18):

$$\Delta(\lambda, E, V_0) = 0. \tag{4.19}$$

В уравнение (4.19) на λ энергия *E* краевого состояния и высота барьера V_0 входят в качестве параметров. Решением уравнения (4.19) являются два значения обратной глубины проникновения $\lambda_{1,2}$, определяющие два значения глубины проникновения краевого состояния в магнитный барьер

$$l_{1,2}(E,V_0) = \frac{1}{\lambda_{1,2}(E,V_0)}.$$
(4.20)

Зависимость $l_{1,2}(E, V_0)$ показана на рис.4.3(а),(b) для параметров модели ВНZ $A=3.65 \text{ eV} \cdot \text{Å}$, $B=-68.6 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$, C=0, $D=-51.2 \text{ eV} \cdot \text{Å}^2$, M=-0.01 eV [57], [209]. Интервалы изменения энергии на рис.4.3 составляют от -0.075 до 0.075 eV (напоминаем, что дираковские состояния (1.49) описываются и положительными, и отрицательными энергиями), а высота барьера меняется от 0.1 до 1 eV, что отвечает параметрам диэлектрических магнитов. Можно видеть, что l_1 на панели (а) является наибольшей из двух глубин, которая и определяет степень проникновения волновой функции краевого состояния в магнитный барьер. Для типичного случая с барьером $V_0=0.2$ эВ глубина проникновения на рис.4.3(а) $l_1 \sim 4$ нм, что почти на порядок превосходит характерный радиус обменного взаимодействия a_1 в нашей модели. Для высоты барьера $V_0>0.2$ эВ глубина взаимодействия спадает до $l_2 \sim 2$ нм, что составляет величину порядка или выше a_1 и остаётся на этом уровне при дальнейшем росте V_0 на рис.4.3. Отсюда можно сделать вывод, что при взаимодействии краевого состояния в модели ВНZ с магнитным барьером (4.16) волновая функция проникает в барьер на величину нескольких (до 10) радиусов обменного взаимодействия, порядка т.е. взаимодействует с большим числом индивидуальных магнитных моментов. Это оправдывает модель взаимодействия с усреднением по большому числу магнитных моментов, развитую в предыдущем п.4.1.1. Схожие оценки по глубине проникновения в область магнита *l*~2-3 нм, оцениваемые по масштабу локализации interfacial state, были получены методами DFT для контакта 3D TИ Bi₂Se₃ и магнита MnSe в работе [95].



Рисунок 4.3. (а) максимальная l_1 и (b) минимальная l_2 глубина проникновения (4.20) волновой функции в магнитный барьер. Для высоты барьера V_0 =0.2 eV максимальная $l_1 \sim 4$ нм, что почти на порядок превосходит характерный радиус обменного взаимодействия a_1 и отвечает взаимодействию краевого состояния со многими индивидуальными магнитными моментами, которое описано в п.4.1.1 [153].

4.1.3. Структура локализованных состояний

Мы переходим к описанию собственно модели КТ с двумя магнитными барьерами на крае ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe. Принципиальная схема такой квантовой точки показана на рис.4.4. Задача является эффективно одномерной,

поскольку рассматривается только движение вдоль края, вдоль которого ориентирована ось Оу. На рис.4.4 магнитные барьеры обозначены розовыми параллелепипедами, которые вытянуты вдоль края достаточно сильно, чтобы обеспечивать затухание волновой функции вглубь барьера. Гамильтониан краевых состояний включает слагаемое (1.48), отвечающее кинетической энергии, плюс слагаемое вида (4.11) для каждого барьера, усреднённое с почти постоянной функцией F(x) профиля барьера на рис.4.2 ВДОЛЬ направления Ox. перпендикулярного краю. Зная, что профиль потенциала барьера на рис.4.2 почти постоянный и резко обрывается на его крае на масштабе $\sim a_1 << L_{x,v}$, мы будем аппроксимировать далее такой профиль комбинацией ступенчатых функций. В итоге мы получаем, что состояния в КТ с двумя магнитными барьерами описываются гамильтонианом [153], [147], [43]

$$H = Ak_{y}\sigma_{z} - M_{1}S(-y)\left(\sigma_{x}\cos\theta_{1} + \sigma_{y}\sin\theta_{1}\right) - M_{2}S(y-L)\left(\sigma_{x}\cos\theta_{2} + \sigma_{y}\sin\theta_{2}\right),$$
(4.21)

Для краевых состояний на базе КЯ HgTe/CdTe значение постоянной A=360 мэВ·нм [57], [209]. Амплитуды барьеров в энергетических единицах, отвечающих величине обменного взаимодействия с характерным масштабом 10-20 мэВ [179], [94], [264] обозначены как $M_{1,2}$, а S(y) обозначает ступенчатую функцию. L есть ширина формируемой квантовой точки, θ_1 и θ_2 есть углы поляризации намагниченности барьеров в плоскости (xy), как это показано на рис.4.4. Размеры барьеров вдоль направлений x и y выбраны компактными исключительно для удобства восприятия. Реальный размер по направлению y вдоль края ТИ должен обеспечивать затухание волновой функции вглубь барьера на его масштабе, что, как мы увидим ниже, реализуется уже для относительно небольшой толщины барьера в 100-150 нм.



Рисунок 4.4. Принципиальная схема квантовой точки (QD), формируемой магнитными барьерами (параллелепипеды) на одномерном крае двумерного ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe и описываемой гамильтонианом (4.21). L есть ширина квантовой точки, θ_1 и θ_2 есть углы поляризации намагниченности барьеров в плоскости (*xy*), M_1 и M_2 определяют высоты барьеров в энергетических единицах [153].

Обратимся к структуре волновых функций дискретного спектра в КТ. Собственными функциями гамильтониана (4.21) будут двухкомпонентные спиноры с энергией

$$|E| < \min(M_{1,2}),$$
 (4.22)

явный вид которых в области КТ при 0 < y < L, слева от левого барьера при y < 0 и справа от правого барьера при y > L записывается следующим образом:

$$\psi_{QD} = \begin{pmatrix} C_1 \exp(iEy/A) \\ C_2 \exp(-iEy/A) \end{pmatrix}, \qquad (4.23)$$

$$\psi_{y<0} = B\begin{pmatrix} 1\\ \alpha_1 \end{pmatrix} \exp(\gamma_1 y), \qquad (4.24)$$

$$\psi_{y>L} = D\begin{pmatrix} 1\\ \alpha_2 \end{pmatrix} \exp(-\gamma_2 y), \qquad (4.25)$$

где введены следующие параметры, зависящие от энергии Е:

$$\begin{cases} \alpha_{1} = -\frac{i\sqrt{M_{1}^{2} - E^{2}} + E}{M_{1}}e^{i\theta_{1}}, \\ \alpha_{2} = \frac{i\sqrt{M_{2}^{2} - E^{2}} - E}{M_{2}}e^{i\theta_{2}}, \\ \gamma_{1,2} = \frac{\sqrt{M_{1,2}^{2} - E^{2}}}{A}, \end{cases}$$
(4.26)

для которых |a_{1,2}|=1. Коэффициенты C_{1,2}, B, D в (4.23)-(4.25) определяются из граничных условий, описывающих непрерывность функции на границах обоих барьеров,

$$\begin{cases} \psi_{y<0}(0) = \psi_{QD}(0), \\ \psi_{QD}(L) = \psi_{y>L}(L) \end{cases}$$
(4.27)

Поскольку предполагается, что барьеры настолько широкие, что волновая функция полностью затухает вглубь барьера, мы не рассматриваем граничные условия на второй, дальней стенке барьера. Учёт конечной проницаемости барьеров приводит к конечному времени жизни состояний в КТ, которое будет оцениваться ниже в п.4.4.

После подстановки волновых функций (4.23)-(4.25) в граничные условия (4.27) мы получим системы линейных однородных уравнений на коэффициенты $C_{1,2}$, B, D. Условием существования нетривиального решения будет равенство нулю определителя системы, которое представляет собой уравнение на собственные значения энергии E [153]:

$$\left(E + i\sqrt{M_1^2 - E^2}\right)\left(E + i\sqrt{M_2^2 - E^2}\right)/(M_1M_2) = \exp(2iEL/A + i(\theta_2 - \theta_1)). \quad (4.28)$$

Для бесконечно высоких барьеров, в которые волновая функция не проникает, уравнение (4.28) может быть решено аналитически [253], [87]. Мы рассматриваем более реалистичную ситуацию, когда волновая функция может (и должна) проникать в барьер, чтобы физически осуществлялось взаимодействие краевого состояния и индивидуальных магнитных моментов, составляющих барьер, о чём мы говорили в п.4.1.1. Для этого случая уравнение (4.28) может быть решено численно. Получив решение для энергии E, мы находим коэффициенты $C_{1,2}$, B, D, полностью определяющие волновую функцию локализованного в КТ состояния, которая примет вид

$$\psi_{QD} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{pmatrix} \exp(iEy/A) \\ \alpha_1 \exp(-iEy/A) \end{pmatrix}, \qquad (4.29)$$

$$\psi_{y<0} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{pmatrix} 1\\ \alpha_1 \end{pmatrix} \exp(\gamma_1 y), \tag{4.30}$$

$$\psi_{y>L} = \frac{1}{\sqrt{G}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \exp(-\gamma_2(y-L) + iEL/A), \qquad (4.31)$$

где нормировочная постоянная G имеет вид

$$G = 2L + \frac{1}{\gamma_1} + \frac{1}{\gamma_2}.$$
 (4.32)

Обсудим некоторые общие свойства характеристического уравнения (4.28). Прежде всего, отметим, что любое его решение E есть вещественное число. Действительно, левая часть (4.28) есть комплексное число z, модуль которого равен единице, в чём можно убедиться непосредственной проверкой. В правой части (4.28) стоит экспонента вида $\exp(i\varphi)$, где фаза $\varphi=2EL/A+\theta_2-\theta_1$, которая, следовательно, тоже является вещественной, как и входящая в неё энергия E. Далее, спектр дискретных состояний ограничен естественным условием (4.22), означающим, что модуль энергии дискретных состояний меньше высоты наименьшего из магнитных барьеров. Кроме того, спектр зависит только от разности ориентаций намагниченности $\theta_2-\theta_1$ барьеров. Наконец, в частном случае $\theta_2-\theta_1=\pi$, т.е. при антипараллельной намагниченности, уравнение (4.28) допускает частное решение E=0, отвечающее точке Дирака спектра (1.49).

Возникает вопрос, при каких условиях в КТ в принципе формируются дискретные уровни и локализованные состояния. Покажем, что для барьеров одинаковой высоты $M_1=M_2$ с параллельной ориентацией намагниченности, например, при $\theta_2=\theta_1=0$, при любой высоте барьеров, т.е. при любом, сколь угодно

малом обменном взаимодействии краевого состояния с индивидуальными магнитными моментами, в КТ формируется пара дискретных уровней. Для этого перепишем уравнение (4.28) в следующей форме:

ſ

$$\begin{cases} f_1(E) = f_2(E), \quad \text{где} \\ f_1(E) = \operatorname{ArcTan} \left[\frac{E\left(\sqrt{M_1^2 - E^2} + \sqrt{M_2^2 - E^2}\right)}{E^2 - \sqrt{(M_1^2 - E^2)(M_2^2 - E^2)}} \right], \quad (4.33) \\ f_2(E) \left(\operatorname{mod} 2\pi \right) = \frac{2EL}{A} + \theta_2 - \theta_1. \end{cases}$$

Решения уравнения (4.33), а, следовательно, и (4.28), существует, если графики функций $f_1(E)$ и $f_2(E)$ имеют точки пересечения. На рис.4.5 эти графики построены для КТ шириной *L*=40 нм для барьеров высоты $M_1=M_2=20$ мэВ с (а) параллельной намагниченностью $\theta_1 = \theta_2 = 0$ и (b) для антипараллельной намагниченности $\theta_2 - \theta_1 = \pi$.



Рисунок 4.5. Графики функций $f_1(E)$ и $f_2(E)$ из (4.33), точки пересечения которых отвечают корням уравнения (4.28), для КТ шириной L=40 нм и барьеров высоты $M_1=M_2=20$ мэВ с (а) параллельной намагниченностью $\theta_1 = \theta_2 = 0$, когда существует пара решений $E_{1,2}=\pm E$ для любой высоты барьеров и (b) для антипараллельной намагниченности $\theta_2 - \theta_1 = \pi$, когда решения с ненулевой энергией существуют лишь при $M>M_0$, где M_0 определено в (4.34) [153].

Из рис.4.5(а) можно сделать вывод, что для параллельно намагниченных барьеров при любой их высоте $M_1=M_2=M$ графики функций $f_1(E)$ и $f_2(E)$ имеют две точки пересечения $E_{1,2}=\pm E$, определяющие два дискретных уровня в КТ, симметричных относительно точки Дирака E=0. Этот вывод представляется весьма важным, поскольку амплитуда обменного взаимодействия, определяющая высоту барьеров M_1 и M_2 , меняется от материала к материалу и в нашей модели играет роль параметра. Как будет обстоять дело в реальных структурах с диэлектрическими магнитами на крае ТИ, покажут будущие эксперименты. В этой связи вывод о наличии двух дискретных уровней, отделённых щелью $\Delta=2E$ и существующих при любой высоте барьеров, представляется важным в плане перспективы применения обсуждаемых КТ в ТИ. Что касается случая магнитных барьеров с антипараллельной намагниченностью на рис.4.5(b), то существование в них дискретных уровней с ненулевой энергией возможно не всегда, а лишь при превышении высотой барьера порогового значения, которое можно определить из (4.33):

$$M > M_0, \ M_0 = \pi A/2L.$$
 (4.34)

Что касается уровня энергии E=0, то для антипараллельной ориентации барьеров на рис.4.5(b) он существует при любой их высоте, как мы уже отмечали ранее при анализе уравнения (4.28).

Обратимся к зависимости энергии дискретных состояний от высоты барьера. Начнём со случая параллельной намагниченности $\theta_1 = \theta_2 = 0$ и одинаковой высоты барьеров $M_1=M_2=M$. Спектр дискретных состояний для этого случая при ширине КТ L=40 нм показан на рис.4.6(а) при изменении высоты барьеров от 0 до 25 мэВ, что отвечает типичным значениям амплитуды обменного взаимодействия. Можно видеть, что в КТ для любой высоты барьеров формируется всего одна пара состояний дискретного спектра |1>, |2> с уровнями $E_{1,2}$ внутри границ E=M, E=-M, что позволяет рассчитывать на использование подобных двухуровневых систем в роли кубитов. На рис. 4.6(b) показана зависимость обратной глубины проникновения волновой функции в барьер γ из (4.26) от высоты барьеров. Для более высоких барьеров глубина проникновения $1/\gamma$ ожидаемо становится ниже, достигая значений 25-30 нм для высоты барьеров M=20 мэВ. Это оправдывает представление о барьерах как об очень широких в плане линейных размеров вдоль направления *Оу* вдоль края ТИ, поскольку уже при линейном размере магнитного барьера, в 3-4 превышающем $1/\gamma$, т.е. порядка 100-120 нм, его можно считать практически непроницаемым.



Рисунок 4.6. (а) Зависимость энергии дискретных состояний в КТ от высоты барьеров $M_1=M_2=M$ для параллельной ориентации намагниченности барьеров $\theta_1 = \theta_2 = 0$ при ширине КТ L=40 нм. Для любой высоты барьеров формируется одна пара состояний дискретного спектра |1>, |2> с уровнями $E_{1,2}$. (b) Зависимость обратной глубины проникновения волновой функции в барьер γ из (4.26) от высоты барьеров. Для более высоких барьеров глубина проникновения $1/\gamma$ ожидаемо ниже, достигая значений 25-30 нм для высоты барьеров M=20 мэВ [153].

Рассмотрим зависимость уровней энергии от высоты барьеров при антипараллельной намагниченности $\theta_1=0$, $\theta_2=\pi$, которая показана на рис.4.7(а) для прежних значений остальных параметров. Уровень в точке Дирака $E_0=0$ существует при любой высоте барьера, а уровни $E_{1,2}$ с ненулевой энергией появляются лишь при превышении высотой барьера порогового значения M_0 из
(4.34). На рис.4.7(b) показана зависимость обратной глубины проникновения γ в барьер. Для состояния $E_0=0$ на линии А глубина проникновения в барьер наименьшая по сравнению с состояниями с ненулевой энергией, которым отвечает линия В.



Рисунок 4.7. (а) Зависимость энергии дискретных состояний в КТ от высоты барьеров $M_1=M_2=M$ для антипараллельной ориентации намагниченности барьеров $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi$ при ширине КТ L=40 нм. Уровень в точке Дирака $E_0=0$ существует при любой высоте барьера, а уровни $E_{1,2}$ с ненулевой энергией появляются лишь при превышении высотой барьера порогового значения M_0 из (4.34). (b) Зависимость обратной глубины проникновения волновой функции в барьер γ из (4.26) от высоты барьеров. Для состояния $E_0=0$ на линии А глубина проникновения в барьер наименьшая по сравнению с состояниями с ненулевой энергией, которым отвечает линия В [153].

Представляет интерес зависимость энергии дискретных уровней в КТ от разности ориентаций $\theta_2 - \theta_1$ их намагниченности. На рис.4.8 показаны графики такой зависимости как функции θ_2 при $\theta_1=0$ для КТ шириной L=40 нм и

одинаковой высоте барьеров $M_1=M_2=20$ мэВ. Можно видеть, что вначале при $\theta_2=0$ мы стартуем со случая параллельной намагниченности, когда формируется два уровня, а финишируем при $\theta_2=\pi$ с тремя уровнями, третий из которых появляется при некотором промежуточном значении θ_2 со стороны верхней границы E=M.



Рисунок 4.8. Зависимость энергии дискретных состояний в КТ от ориентации намагниченности θ_2 при $\theta_1=0$ для КТ шириной *L*=40 нм и одинаковой высоте барьеров $M_1=M_2=20$ мэВ. При $\theta_2=0$ для параллельной намагниченности формируется два уровня, при $\theta_2=\pi$ есть три уровня, третий из которых появляется при некотором промежуточном значении θ_2 со стороны верхней границы E=M [153].

В заключение этого параграфа остановимся на пространственном поведении плотности вероятности $|\psi|^2$, описываемом волновой функцией (4.23)-(4.25), а также спиновой плотности

$$S_k(y) = \psi^+ \sigma_k \psi, \quad k = x, y, z. \tag{4.35}$$

Несмотря на то, что базис состояний (1.42) модели ВНZ отвечает по построению скорее эффективному спину, т.е. псевдоспину, получаемый в этом базисе гамильтониан (1.48) имеет своими собственными функциями спиноры, для которых проекция $\sigma_z=\pm 1$, а атомные функции |E1, $m_z=1/2>$, |H1, $m_z=3/2>$, |E1, $m_z=-1/2>$, |H1, $m_z=-3/2>$ в базисе модели ВНZ отвечают положительным и отрицательным проекциям момента на ось *Oz*. Это оправдывает использование выражения (4.35) для оценки ориентации спиновой плотности внутри КТ и в магнитных барьерах вблизи границы с КТ. Сразу отметим, что *z*-компонента спиновой плотности (4.35) для состояний (4.23)-(4.25) тождественно равна нулю,

поскольку магнитные моменты барьеров в нашей модели ориентированы в плоскости (*xy*). Что касается *x*- и *y*-компонент, то они определяются выражениями, зависящими от энергии *E* дискретного уровня. Для плотности в области КТ 0<*y*<*L* они имеют вид

$$S_{xQD}(y) = \frac{2}{G} \left(-\frac{E}{M_1} \cos\left(\theta_1 - \frac{2Ey}{A}\right) + \frac{\sqrt{M_1^2 - E^2}}{M_1} \sin\left(\theta_1 - \frac{2Ey}{A}\right) \right),$$
(4.36)

$$S_{yQD}(y) = \frac{2}{G} \left(-\frac{E}{M_1} \sin\left(\theta_1 - \frac{2Ey}{A}\right) - \frac{\sqrt{M_1^2 - E^2}}{M_1} \cos\left(\theta_1 - \frac{2Ey}{A}\right) \right).$$
(4.37)

Для областей внутри барьеров вблизи границы с КТ спиновая плотность определяется схожими с (4.36), (4.37) выражениями с добавлением экспоненциального фактора $\exp(\pm\gamma_{1,2} y)$, определяющего спадание вглубь барьера. Отметим структуру спиновой плотности для центрального уровня $E_0=0$ для антипараллельной ориентации барьеров $\theta_1=0$, $\theta_2=\pi$. На рис.4.9 показана зависимость (а) плотности вероятности $|\psi|^2$ и (b) *у*-компоненты спиновой плотность вероятности (4.35) для этого состояния. Можно видеть, что и плотность вероятности, и спиновая плотность являются постоянными в области КТ 0 < y < L. Из (4.36), (4.37) можно получить, что для этого состояния $S_{xQD}(y) = 0$ аnd $S_{vOD}(y) = -2/G$, т.е. спин в области КТ ориентирован параллельно краю ТИ.

Подводя итог построенным на рис.4.6–4.8 спектрам дискретных уровней в КТ на крае ТИ, можно сказать, что наблюдаемое разнообразие конфигураций уровней, настраиваемых при изменении параметров КТ или окружающих её магнитных барьеров, может давать дополнительные возможности в приложениях рассматриваемых КТ при передаче и обработке информации.



Рисунок 4.9. Зависимость (а) плотности вероятности $|\psi|^2$ и (b) *у*-компоненты спиновой плотности (4.35) для состояния $E_0=0$ при антипараллельной намагниченности барьеров $\theta_1=0$, $\theta_2=\pi$. Плотность вероятности и спиновая плотность являются постоянными в области КТ 0 < y < L. Проекции спиновой плотности (4.36), (4.37) равны $S_{xQD}(y) = 0$ и $S_{yQD}(y) = -2/G$, т.е. спин в области КТ ориентирован параллельно краю ТИ [153].

4.1.4. Состояния непрерывного спектра

Следует отметить, что, помимо состояний дискретного спектра, в системе с гамильтонианом (4.21) существуют и краевые состояния непрерывного спектра, в которые также могут происходить переходы из состояний дискретного спектра. Расчёт таких состояний аналогичен расчёту состояний дискретного спектра, однако условие их существования состоит в превышении амплитуды энергии значения максимальной высоты барьеров,

$$|E| > \max(M_{1,2}).$$
 (4.38)

По аналогии с (4.23)–(4.25), запишем собственные функции гамильтониана (4.21) при выполнении условия (4.38) [43], [44]:

$$\psi_{QD} = \begin{pmatrix} C_1 e^{iEy/A} \\ C_2 e^{-iEy/A} \end{pmatrix}, \tag{4.39}$$

$$\begin{split} \psi_{y<0} &= B_{1} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-E + \sqrt{E^{2} - M_{1}^{2}}}{M_{1}} e^{i\theta_{1}} \end{pmatrix} \exp\left(i\frac{\sqrt{E^{2} - M_{1}^{2}}}{A}y\right) + \\ &+ B_{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-E - \sqrt{E^{2} - M_{1}^{2}}}{M_{1}} e^{i\theta_{1}} \end{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\sqrt{E^{2} - M_{1}^{2}}}{A}y\right), \end{split}$$
(4.40)
$$\\ \psi_{y>L} &= D_{1} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-E + \sqrt{E^{2} - M_{2}^{2}}}{M_{2}} e^{i\theta_{2}} \end{pmatrix} \exp\left(i\frac{\sqrt{E^{2} - M_{2}^{2}}}{A}y\right) + \\ &+ D_{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{-E - \sqrt{E^{2} - M_{2}^{2}}}{M_{2}} e^{i\theta_{2}} \end{pmatrix} \exp\left(-i\frac{\sqrt{E^{2} - M_{2}^{2}}}{A}y\right). \end{aligned}$$
(4.41)

Коэффициенты $C_{1,2}$, $B_{1,2}$, $D_{1,2}$, вновь определяются из граничных условий (4.27). Однако, в случае состояний непрерывного спектра у нас имеется шесть, а не четыре неизвестных коэффициента, поскольку мы не связаны условием затухания волновой функции в области барьера, которая в (4.39)-(4.41) всюду представляет собой комбинацию плоских волн, умноженных на двухкомпонентные спиноры. Четыре из шести коэффициентов определяются из системы (4.27). Остальные два коэффициента находятся следующим образом. В наших численных расчётах мы будем моделировать состояния континуума вдоль протяжённого, но всё же конечного образца ТИ с размером 2*d* вдоль края, отвечающим типичным полупроводниковым образцам с *d*=5...10 мкм. Такие размеры обеспечивают выполнение условия *d>L*, где *L* есть ширина КТ. В этом случае континуум состояний фактически описывается как очень плотный с точки зрения числа состояний набор дискретных уровней, дающих величину порядка 10³ состояний на интервал 100 мэВ, в то время как в КТ, рассматриваемой в этом и следующих параграфах, формируется 2-3 уровня на интервале 40-50 мэВ. Как показали наши расчёты, такой набор вполне адекватно описывает континуум как в обычных полупроводниковых нанопроволоках ([148], [149]), так и в рассматриваемой задаче с КТ в ТИ [43], [44]. При таком описании мы можем потребовать выполнения циклического граничного условия

$$\psi(d) = \psi(-d) \tag{4.42}$$

на удалённых границах образца, которое представляет собой пятое из искомых равенств. Шестое, последнее условие для определения коэффициентов волновой функции (4.39)-(4.41), состоит в нормировании её на единицу на рассматриваемом большом интервале 2*d*. Отметим, что секулярное уравнение вида (4.28) для энергии *E* состояний непрерывного спектра отсутствует, и единственным условием их существования является превышение энергией *E* амплитуды магнитных барьеров M_1 и M_2 , то есть выполнение условия (4.38).

Состояния непрерывного спектра будут использованы нами ниже в п.4.3 при расчёте скорости переходов в эти состояния при релаксации энергии с уровней дискретного спектра, а также в п.4.5 при исследовании динамики в периодическом электрическом поле.

4.2. Структура с двойной КТ, сформированной тремя магнитными барьерами

При изучении моделей КТ возникает естественный вопрос о структуре не с одной, а с двумя и более КТ. Рассмотрим обобщение гамильтониана (4.21) и структуры на рис.4.4 для структуры, которая содержит три магнитных барьера, между которыми формируются две КТ шириной L_1 и L_2 , разделённые центральным барьером ширины L_b , как это показано на рис.4.10 [26]. Гамильтониан в этом случае можно записать в виде

$$H = Ak_{y}\sigma_{z} - M_{1}S(-L_{1} - y)(\sigma_{x}\cos\theta_{1} + \sigma_{y}\sin\theta_{1}) - M_{b}(S(y) - S(y - L_{b}))(\sigma_{x}\cos\theta_{b} + \sigma_{y}\sin\theta_{b}) - M_{2}S(y - L_{2} - L_{b})(\sigma_{x}\cos\theta_{2} + \sigma_{y}\sin\theta_{2}).$$

$$(4.43)$$

Как и ранее, в (4.43) M_1 , M_b , M_2 обозначают высоты барьеров в энергетических единицах, а $\theta_{1,2,b}$ определяют ориентацию намагниченности каждого барьера в плоскости (*x*,*y*). Нарис.4.10 показан случай ориентации при $\theta_1=0$, $\theta_b=\pi$, $\theta_2=\pi$.



Рисунок 4.10. Модель двойной квантовой точки, формируемой на одномерном крае ТИ магнитными барьерами, описываемая гамильтонианом (4.43). L_1 , L_2 – ширины квантовых точек, L_b – ширина центрального барьера, M_1 , M_b , M_2 – высоты барьеров в энергетических единицах. Стрелочками схематически показаны ориентации магнитных моментов в плоскости (*x*,*y*) для каждого барьера. Показан случай поляризации при θ_1 =0, θ_b = π , θ_2 = π [26].

По аналогии с (4.23)-(4.25), запишем собственные функции гамильтониана (4.43) во всех пяти областях, видимы на рис.4.10:

$$\begin{cases} \psi_{y<-L_{1}} = B\left(\frac{1}{-\frac{i\sqrt{M_{1}^{2}-E^{2}}+E}{M_{1}}}e^{i\theta_{1}}\right)e^{\frac{296}{M_{1}^{2}-E^{2}}y},\\ \psi_{QD1} = \left(\frac{1}{-\frac{iEy}{M_{1}^{2}}}\right),\\ \psi_{0L_{b}+L_{2}} = J\left(\frac{i\sqrt{M_{2}^{2}-E^{2}}-E}{M_{2}}e^{i\theta_{2}}\right)e^{-\frac{\sqrt{M_{2}^{2}-E^{2}}}{A}y}. \end{cases}$$

$$(4.44)$$

Воспользовавшись условиями (4.27) сшивки волновой функции на границах барьеров $y=-L_1$, y=0, $y=L_b$ и $y=L_b+L_2$, мы получим систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов *B*, $C_{1,2}$, $D_{1,2}$, $H_{1,2}$, *J* для функций (4.44). Существование нетривиального решения этой системы имеет место при условии равенства нулю её определителя, что приводит к характеристическому уравнению на энергию *E* дискретных уровней в двойной КТ. Ниже мы рассмотрим некоторые из её решений для таких значений параметров, при которых возможно управление областью локализации волновых функций.

После нахождения коэффициентов для волновой функции (4.44) область её локализации можно описать через сумму коэффициентов $|C_1|^2 + |C_2|^2$ для левой КТ и через сумму $|H_1|^2 + |H_2|^2$ для правой КТ. Введём отношение этих вероятностей

$$P \equiv \frac{\left|C_{1}\right|^{2} + \left|C_{2}\right|^{2}}{\left|H_{1}\right|^{2} + \left|H_{2}\right|^{2}},$$
(4.45)

которое будет характеризовать локализацию соответствующей волновой функции: при P>>1 волновая функция локализована в левой КТ, а при P<<1 в правой КТ. Возникает вопрос, каким образом меняется отношение (4.45) для данного энергетического уровня при изменении параметров системы. Рассмотрим режим антипараллельной ориентации намагниченности крайних барьеров $\theta_I=0$, $\theta_2=\pi$. На рис.4.11 показана структура уровней системы в зависимости от ориентации намагниченносто барьера θ_b . Остальные параметры системы $L_{1,2,b}=100$ нм, $M_{1,2,b}=20$ мэВ. На каждой линии цветом показано отношение (4.45).



Рисунок 4.11. Энергетический спектр как функция угла намагниченности центрального барьера θ_b при $\theta_l=0$, $\theta_2=\pi$, $L_{1,2,b}=100$ нм, $M_{1,2,b}=20$ мэВ. Синим цветом показаны состояния с локализацией в правой КТ, когда отношение (4.45) P <<1, оранжевым – состояния с локализацией в левой КТ при P>>1. На вставке справа показана область антикроссинга для выделенной пунктиром зоны, когда волновые функции уровней (b), (e) локализованы одновременно в двух КТ [26].

В оранжевой и жёлтой области на рис.4.11 волновая функция практически полностью локализована в левой КТ, а в синей и голубой области – в правой КТ. Из рис.4.11 можно сделать вывод, что в спектре присутствует антикроссинг при ориентации намагниченности центрального барьера $\theta_b = \frac{\pi}{2}$ и $\theta_b = \frac{3\pi}{2}$, при этом

сближение уровней определяется проницаемостью центрального барьера. Для примера отмечены точки (b) и (e) на рис.4.11 в области антикроссинга, увеличннный фрагмент которой показан на вставке справа для выделенной слева пунктиром зоны.

Представляет интерес оценка щели в спектре вблизи точки антикроссинга на рис.4.11. Раскладывая дисперсионное уравнение вблизи такой точки, можно получить оценку для величины щели на рис.4.11 в виде $\Delta \sim (AM/L)^{1/2} \exp(-LM/A)$. Для параметров на рис.4.11 мы получим, что Δ =0.033 мэВ, что является хорошим приближением для результатов представленного на рис.4.11 численного расчёта. Отметим, что щель Δ имеет максимум при небольшой высоте барьера $M_0 = A/2L = 1.8$ мэВ, равный $\Delta_m \sim 1.5$ мэВ, и далее с ростом M спадает. Однако, для приложений рассматриваемых КТ для создания кубитов такие низкие барьеры и широкие щели в спектре являются мало пригодными. Ниже мы уквидим, что точки антикроссинга являются точками смены области локализации волновой функции для данного уровня, как это также можно отметить из смены цветов на рис.4.11. Этот эффект представляется устойчивым к малым вариациям параметров системы, поскольку уровни одного дублета вдали от точек антикроссинга отделены значительной щелью от остальных дублетов, как это видно на рис.4.11.

Рассмотрим структуру плотности вероятности и спиновой плотности для примеров, отмеченных точками (a), (b), (c) на спектре на рис.4.11. Результаты представлены на рис.4.12 для плотности вероятности $|\psi|^2$ (черная сплошная линия) и спиновых плотностей $S_{x,y} = \psi^+ \sigma_{x,y} \psi$ для S_x (сиреневая пунктирная линия) и S_y (оранжевая сплошная линия). Можно сделать вывод, что для точек (a), (c), далёких от области антикроссинга, волновые функции локализованы в левой или правой КТ соответственно. Для точки (b), отвечающей области антикроссинга на рис.4.11, волновая функция локализована одновременно в двух квантовых точках.



Рисунок 4.12. Распределения вдоль структуры с двойной квантовой точкой для плотности вероятности $|\psi|^2$ (черная сплошная линия) и спиновых плотностей S_x (сиреневая пунктирная линия), S_y (оранжевая сплошная линия) для уровней энергии (a), (b), (c), отмеченных на рис.4.11 [26].

Абсолютная вероятность нахождения электрона в левой или правой КТ может быть получена интегрированием $|\psi|^2$ по данной КТ и представляет собой величину, близкую к единице для рис.4.12 (а),(с) и к 1/2 в каждой точке для рис. 3(b), если пренебрегать вкладом от барьерной области. Третья проекция спина *S*₂ для состояний (2) в нашей модели тождественно равна нулю, как это отмечалось в п.4.1. Видно, как при переходе угла θ_b через точку антикроссинга происходит смена области локализации волновой функции: она идёт последовательно от (а) локализации в левой КТ, (b) локализации в обеих КТ в точке антикроссинга и (c) локализации в правой КТ. Аналогичный процесс наблюдается и для уровней (d) – (f) на рис.4.11 с обратной последовательностью областей локализации. Как видно из рис.4.11, интервал изменения θ_b около точки антикроссинга для смены области локализации может быть относительно небольшим, около 20–30 градусов, что должно способствовать практической реализации данного механизма управления локализацией состояний в экспериментах.

4.3. Релаксация энергии в КТ на крае ТИ с участием фононов

4.3.1. Используемые приближения и схема расчёта скорости релаксации

Одним из актуальных вопросов при изучении любых квантовых состояний является их время жизни по отношению к процессам релаксации. В данном параграфе мы рассмотрим сравнительно узкую задачу о релаксации энергии для описанных выше состояний дискретного спектра в КТ, сформированной магнитными барьерами на крае ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe [43]. Мы рассмотрим процессы с участием фононов, используя известные модели электрон-фононного взаимодействия в полупроводниках. Нами будет использована простейшая модель электрон-фононного взаимодействия в приближении деформационного потенциала, т.е. микрополя [11]. Кроме того, дополнительно будет вычислена скорость релаксации и при учёте макрополя, т.е. полярных оптических фононов [11], но лишь для расчёта переходов между двумя состояниями дискретного формируемых в КТ спектра $|1\rangle$ И $|2\rangle$. при параллельной ориентации намагниченности барьеров, как это было описано в п.4.1. Ниже будет показано, что при низких температурах такие переходы являются доминирующими. Кроме того, учёт полярных фононов для переходов в непрерывный спектр требует более точных сведений о параметрах фононов во всём объёме гетероструктуры HgTe/CdTe с фазой ТИ, которые к настоящему времени ещё не определены.

Расстояния между двумя дискретными уровнями $E_{1,2}$, показанными на рис.4.6(а), состояния которых мы будем обозначать как |1> и |2>, при типичных значениях ширины КТ L=40–60 нм составляют 15–20 мэВ. Такой же порядок имеют и расстояния от любого уровня дискретного спектра до состояний непрерывного спектра, начинающихся при энергиях |E|>M, где M=20 мэВ. Это значит, что доминирующая роль в переходах принадлежит продольным оптическим фононам, энергия которых в HgTe, в пространственной области которого расположены краевые состояния, попадает в указанный интервал. Модель спектра продольных фононов в объёмном HgTe построена нами как максимально близкая к экспериментальным данным из работы [211]. В упрощённой форме, допускающей аналитическое описание в пределе изотропной

зависимости частоты от компонент волнового вектора $\omega(q_1, q_2, q_3)$, она показана на рис.4.13 для какого-либо из направлений *q_k*. Приближение изотропного спектра для продольных фононов находится в хорошем согласии с экспериментальными [211]. Нами рассматривается взаимодействие данными с продольными оптическими фононами (LO) и с продольными акустическими фононами (LA), которые вносят основной вклад в релаксацию, поскольку энергии поперечных фононов уступают энергии продольных. Учёт акустических фононов необходим при высоких температурах, когда становятся эффективными переходы с поглощением фононов с уровня |2> дискретного спектра в КТ в краевые состояния непрерывного спектра с энергией Е>М.



Рисунок 4.13 Аналитическое изотропное приближение для спектра фононов в HgTe. Показана ветвь продольных оптических фононов *LO* и ветвь продольных акустических фононов *LA* [43].

Наличие точек с равной нулю групповой скоростью на ветви *LO* в точках максимума частоты фонона, которые заметны на рис.4.13., приводит к особенностям плотности состояний в фононном спектре. Это, как показывают наши расчёты, даёт увеличение скорости релаксации, если параметры КТ таковы, что расстояние между уровнями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ дискретного спектра в точности соответствует максимуму частоты *LO* фонона $\omega_{LO}=2.82\cdot10^{13}$ с⁻¹. На практике, однако, точное выполнение этого условия технологически маловероятно и

практически нецелесообразно, поэтому данная особенность в дальнейшем нами рассматриваться не будет.

Скорость релаксации энергии Γ_{ij} между состояниями |i> и |j> с энергиями E_i, E_j при переходах с участием фонона с волновым вектором (q_1, q_2, q_3) и энергией $\hbar \omega_q$ в кристалле объёмом V определяется как [11]

$$\Gamma_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{V d^3 q}{(2\pi)^3} |M_{ij}^{q}|^2 \left(N_q + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta \left(E_i - E_j \mp \hbar \omega_q \right), \tag{4.46}$$

где верхний знак отвечает испусканию, а нижний – поглощению фононов, описываемых равновесным распределением Планка N_q . Из (4.46) следует, что для нашей структуры при низких температурах 1–5 К, когда для типичных энергий переходов 10–20 мэВ среднее число фононов N_q <<1, будут доминировать процессы испускания фононов, т.е. переходы «сверху вниз». И лишь для более высоких температур 50–100 К могут быть существенны переходы вида «снизу вверх» с поглощением фононов. Матричный элемент деформационного потенциала для оптических (*LO*) и акустических (*LA*) фононов вычисляется как [11]

LO:
$$\left|M_{ij}^{q}\right|^{2} = \frac{\hbar a C_{op}^{2}}{V 2M\omega_{s}} \left|\left\langle i\right|e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}\left|j\right\rangle\right|^{2}$$
(4.47)

И

LA:
$$\left|M_{ij}^{q}\right|^{2} = \frac{\hbar a^{3} C_{ac}^{2}}{V 2M\omega_{q}} \left|\left\langle i \right| q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \left| j \right\rangle\right|^{2}.$$
(4.48)

Здесь a=0.646 нм есть постоянная решётки в HgTe, $M = 1.29 \cdot 10^{-22}$ г есть приведённая масса атомов в элементарной ячейке, ω_s или ω_q обозначают частоту оптического фонона при q=0, или частоту акустических фононов, соответственно. Эти параметры, а также константы деформационного потенциала для TU на базе КЯ HgTe/CdTe $C_{op}=20$ эВ и $C_{ac}=5$ эВ были взяты нами из [225]. Кроме того, при переходах между дискретными уровнями в КТ нами рассчитывалась также скорость релаксации при учёте макрополя от взаимодействия с полярными

оптическими фононами (*PO*), взаимодействие с которыми разрешено симметрией решётки HgTe со структурой цинковой обманки. В этом случае матричный элемент электрон-фононного взаимодействия равен [11]

$$PO: \qquad \left|M_{ij}^{q}\right|^{2} = \frac{e^{2} \hbar a^{3} C_{P}^{2}}{V 2 M \omega_{s}} \left|\left\langle i \left| \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}}{i q} \right| j \right\rangle\right|^{2}, \qquad (4.49)$$

$$C_P = \left(\frac{4\pi M}{a^3} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right)\right)^{\frac{1}{2}} \omega_{LO}, \qquad (4.50)$$

где $\omega_{LO}=2.82\cdot10^{13}$ с⁻¹ есть предельная частота продольного оптического фонона, $\varepsilon_0=20$ и $\varepsilon_{\infty}=14$ есть статическая диэлектрическая проницаемость и диэлектрическая проницаемость на больших частотах соответственно [225]. Для переходов из дискретного в непрерывный спектр канал с взаимодействием (4.49) нами не учитывался, т.к. пока не известны точные характеристики макроскопического поля фононов в ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe во всём объёме гетероструктуры, в то время как переходы между дискретными уровнями отвечают локальному взаимодействию с фононами в узкой краевой области образца.

4.3.2. Расчёт скорости релаксации при низкой температуре

Результаты расчёта скорости релаксации энергии (4.46) показаны на рис.4.14 для низкой температуры T=4 К, в полулогарифмическом масштабе как функция ширины КТ L. При положении уровня Ферми вблизи точки Дирака E=0, как это видно из рис.4.6(а), при возбуждении внешним полем носителей на уровень |2> после прекращения действия возмущения будет доминировать переход на нижний уровень |1> дискретного спектра с испусканием оптического фонона. Дискретные уровни на протяжении процесса перехода предполагаются выведенными из термодинамического равновесия. Переходы с поглощением фонона В вышележащие состояния непрерывного спектра при низкой температуре подавлены, поскольку N_a<<1. Также, в силу принципа Паули, сильно подавлены переходы с нижнего уровня |1> в состояния непрерывного спектра с отрицательными энергиями относительно точки Дирака E=0, поскольку при T=4 К эти состояния почти полностью заполнены. При этом фактор $(1-f_j) \approx 0$, где f_j есть функция Ферми для конечных состояний в непрерывном спектре, которые предполагаются находящимися в состоянии термодинамического равновесия.

Мы отдельно рассчитываем скорость релаксации (4.46) с матричными элементами (4.47) для деформационного потенциала оптических фононов и с матричными элементами (4.49) для полярных оптических фононов. Из рис.4.14 можно сделать вывод, что скорость релаксации почти монотонно растёт с шириной КТ L, и для L=60 нм она на шесть порядков превосходит значение для L=42 нм. Объяснение этому эффекту заключается в расположении дискретных уровней в КТ на рис.4.6(a), а также в зависимости матричного элемента (4.47) от волнового вектора фонона (q_1 , q_2 , q_3). С ростом L уровни сближаются, и переходы происходят с меньшими значениями энергии LO фонона $\hbar\omega_q$. Следуя ходу дисперсионной кривой для LO фононов на рис.4.13 в области $q_k < 5$ нм⁻¹, при уменьшении энергии фонона в переходах участвуют фононы со всё меньшими значениями модуля волнового вектора q_k. Здесь k=1,2,3, т.к. мы приняли для оценки изотропную модель спектра фононов. Матричный же элемент (4.47), как это следует из его аналитического и численного расчёта, является быстро спадающей функцией волнового вектора фононной экспоненты. В результате скорость релаксации тем выше, чем более длинноволновые фононы участвуют в переходах, то есть чем более широкая КТ рассматривается. Второй вывод, следующий из рис.4.14, заключается в качественно одинаковом поведении и величине скорости релаксации в канале взаимодействия с оптическими фононами от микрополя, т.е. деформационного потенциала (DO), и от макрополя, т.е. полярных фононов (РО). Такой результат позволяет говорить о качественно схожей оценке скорости переходов в целом, вне зависимости от характера участвующих в нём оптических фононов. Ещё одним вопросом, возникающим при анализе рис.4.14, является вопрос об экстраполяции результатов на КТ других размеров, в особенности на более узкие КТ с L<42 нм.



Рисунок 4.14. Скорость релаксации между уровнями дискретного спектра $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ для температуры T=4 К. Кругами показан вклад оптических фононов в приближении деформационного потенциала (*DO*), квадратами обозначен вклад от взаимодействия с полярными оптическими фононами (*PO*) [43].

Такое граничное значение ширины КТ в модели спектра уровней на рис.4.6(а) и модели фононного спектра на рис.4.13 обусловлено максимальной энергией оптических фононов в HgTe, которая в нормальных условиях составляет около 18.5 мэВ [211]. Если КТ имеет ширину менее 42 нм, то уровни |1> и |2> отстоят друг от друга на величину энергии, превосходящую максимальную энергию фононов в HgTe. Это означает, что в более узких КТ канал релаксации через оптические фононы будет малоэффективен, особенно при низких температурах, т.е. время жизни на возбуждённом состоянии |2> сильно возрастёт. Однако, технологические сложности процессов формирования наноразмерных объектов с включением в них магнитов также микро- и нанометровых размеров делают возможности изготовления таких КТ всё более затруднительными с уменьшением размера КТ. Таким образом, для приложений предложенной в нашей диссертации модели КТ в качестве двухуровневой системы с медленной релаксацией энергии необходим технологический компромисс, сочетающий малые размеры КТ, в

которой релаксация уменьшена или подавлена, и существующие технологические возможности.

4.3.3. Релаксация в непрерывный спектр при высокой температуре

При повышении температуры с Т=4 К до Т=77 К канал релаксации между дискретными уровнями с испусканием фонона, описанный в предыдущем пункте, не претерпевает существенных изменений, поскольку значение фактора (N_a +1) в (4.46) для оптических фононов с энергией 14–18 мэВ остаётся близким к единице. каналы Поэтому ΜЫ обратим своё внимание на другие релаксации, открывающиеся при повышении температуры, а именно, на релаксацию из уровней |1> и |2> дискретного спектра КТ в состояния непрерывного спектра. Нами рассмотрено пять таких каналов, и ниже они будут кратко описаны. Результаты для скорости релаксации в этих каналах сведены воедино на рис.4.15 также как функция ширины КТ *L*.

(А). Скорость переходов с верхнего уровня |2> в краевые состояния непрерывного спектра с поглощением оптических фононов обозначена на рис.4.15 кружками, соединёнными сплошной линией, и схематически помечена надписью LO |2> —> Up (Edge). Такие процессы с поглощением оптического фонона эффективны лишь при высокой температуре, составляющей в нашем примере 77 К, поскольку лишь в этом случае имеется существенное среднее число оптических фононов. Поскольку краевые состояния непрерывного спектра существуют с любыми энергиями E > M, где M = 20 мэВ есть высота магнитного барьера, и начинаются сразу же над краем барьера, то для всех рассмотренных значений ширины КТ L эти переходы будут вносить существенный вклад в релаксацию при высокой температуре, составляющий в среднем 10^{12} с⁻¹.

(Б). Скорость переходов с нижнего уровня $|1\rangle$ в краевые состояния непрерывного спектра с испусканием оптических фононов показана на рис.4.15 квадратами, соединёнными штриховой линией, и обозначена надписью $LO |1\rangle \rightarrow$ Down (Edge). Такие переходы с испусканием оптического фонона становятся эффективными при *T*=77 К, поскольку существенная часть краевых

состояний под уровнем Ферми с энергией E < -M при высокой температуре является свободной, и множитель $(1-f_j)$, определяющий вероятность этого, уже существенно отличается от нуля.



Рисунок 4.15. Скорость релаксации между состояниями дискретного и непрерывного спектров для *T*=77 К. Различные каналы релаксации показаны кругами, квадратами, ромбами, треугольниками и звёздочками. Обозначения см. в п. (А)–(Д) п. 4.3.3 [43].

Мы видим, что, как и в предыдущем пункте, в этом случае скорость релаксации с нижнего уровня слабо зависит от размера КТ, и достигает существенных значений 10^{11} – 10^{12} с⁻¹. Это означает, что при высоких температурах становится эффективной релаксация не только с «возбуждённого» уровня дискретного спектра |2>, но и с «основного» уровня |1>, если принимать во внимание краевые состояния непрерывного спектра. Такой канал релаксации также необходимо учитывать при создании схем кубитов на данной КТ, работающих при высоких температурах.

(В). Скорость переходов с верхнего уровня |2> в состояния непрерывного спектра объёмного материала с поглощением оптических фононов показана на рис.4.15 ромбами, соединёнными штрихпунктирной линией, и обозначена

надписью LO |2> -> Up (Bulk). Состояния объёмного материала представляют собой двумерный электронный газ в КЯ HgTe/CdTe, на краю которого образуется спектр краевых состояний. Энергетический спектр и вид волновых функций двумерного электронного газа в такой структуре хорошо известен, и взят нами из работ [57], [169], [209], с целью оценки скорости релаксации в такие состояния с верхнего дискретного уровня в КТ. Упрощённо, состояния объёмного образца могут быть описаны как плоские волны в плоскости двумерного электронного газа (xy), локализованные в поперечном направлении Oz роста КЯ. Спинорный характер этих состояний отражается преимущественно в многокомпонентной форме вектора-столбца в базисе блоховских функций, содержащего функции $\{f_i(z)\}$, описывающие их локализацию в КЯ. Для нашей задачи детальная структура этого спинора не является существенной, т.к. все его компоненты локализованы в области КЯ, и этого оказывается достаточно для оценки матричных элементов (4.47). Поскольку процесс перехода с уровня |2> в состояния непрерывного спектра идёт с поглощением фонона, он становится существенным лишь при высоких температурах. Из рис.4.15 видно, что его скорость слабо зависит от размера КТ, и достигает существенной величины 10¹² с⁻ ¹. Что касается «симметричного» процесса ухода с нижнего уровня |1> в состояния объёмного образца с отрицательными энергиями (ниже точки Дирака), то такие процессы не разрешены, поскольку нижняя половина спектра объёмных состояний в КЯ HgTe/CdTe отстоит от точки E=0 дальше, чем верхняя половина [57], [169], [209], и энергии даже оптических фононов для реализации такого перехода оказывается недостаточно.

(Г). Скорость переходов с поглощением акустических фононов с уровня $|2\rangle$ в краевые состояния непрерывного спектра показана на рис.4.15 треугольниками, соединёнными сплошной линией, и обозначена надписью $LA |2\rangle \rightarrow$ Up (Edge). При T=77 К значение N_q в (4.46) для акустических фононов становится существенным, и переходы с поглощением акустического фонона в краевые состояния непрерывного спектра также приобретают заметную эффективность. Поскольку энергия продольных акустических фононов в HgTe

ограничена величиной около 11.5 мэВ [211] (см. также рис.4.13), указанные переходы с их участием эффективны лишь для КТ с L = 40-47 нм, поскольку для более широких КТ дискретные уровни располагаются ближе к точке Дирака E=0, и энергии акустических фононов оказывается недостаточно, чтобы осуществить переход в непрерывный спектр с энергией E > M. По этой причине неэффективны и переходы в состояния объёмного материала. Кроме того, максимальная энергия акустических фононов достигается при больших волновых числах, что приводит к сильному уменьшению амплитуды матричного элемента (4.48). Всё это приводит к тому, что скорость релаксации на акустических фононов существенно, на тричетыре порядка ниже скорости релаксации на оптических фононах, как это видно из рис.4.15, и составляет около 10^8-10^9 с⁻¹. Существенным является то, что эта скорость возрастает с уменьшением размера КТ, что может быть дополнительным ограничительным фактором при использовании очень малых значений L для приложений таких КТ.

(Д). Скорость переходов с испусканием акустических фононов с уровня |1> в краевые состояния непрерывного спектра показана на рис.4.15 звёздочками, соединёнными сплошной линией, и обозначена надписью LA |1> -> Down (Edge). При T=77 К значение множителя $(1-f_j)$, как это обсуждалось в пункте (Б), достаточно велико, чтобы учитывать переходы с нижнего уровня |1> в краевые состояния непрерывного спектра с испусканием акустического фонона. К расчёту их величины применимы все соображения предыдущего пункта (Г). Скорость релаксации в этом канале, как видно из рис.4.15, составляет $10^7 - 10^9$ с⁻¹, и вновь возрастает с уменьшением размера КТ.

4.3.4. Выводы по п.4.3.

В этом параграфе мы описали расчёт скорости релаксации энергии при переходах с участием фононов для одномерных квантовых точек различного продольного размера *L*, образованных магнитными барьерами на краю двумерного топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe [43]. Полученные результаты свидетельствуют о существовании области параметров

структур, отвечающих небольшим квантовым точкам с продольным размером L < 42 нм, где может быть обеспечена более медленная релаксация энергии при низкой температуре T=4 K, по сравнению с квантовыми точками с размером L>42 нм. Наличие такой области говорит о принципиальной перспективности данных объектов в том числе и для создания новых типов кубитов. Дальнейшие исследования требуют, в первую очередь, расчётов времени релаксации для недиагональных компонент матрицы плотности, а также уточнения параметров деформационного потенциала и потенциала взаимодействия с полярными фононами для конкретных типов гетероструктур с фазой топологического изолятора. Кроме того, необходимо прояснить роль поверхностных фононных мод в их возможном вкладе в релаксацию, а также более детально учесть взаимодействие с состояниями в объёме гетероструктуры.

4.4. Время жизни квазистационарных состояний в КТ в ТИ с магнитными барьерами

В параграфе обратимся ЭТОМ МЫ К вопросу о времени жизни квазистационарных состояний в КТ, образованных магнитными барьерами на крае ТИ, если проницаемость барьеров конечна [151]. В нашей модели это отвечает конечной ширине обоих барьеров на рис.4.4 вдоль края, для которых мы будем предполагать линейные размеры $d_{1,2}$ соответственно, как это показано на рис.4.16. В реальной структуре параметр $d_{1,2}$, разумеется, всегда конечен, однако для размера $d >> 1/\gamma$ где $1/\gamma \sim 20..40$ нм есть характерная глубина проникновения волновой функции в барьер, его можно считать бесконечным, что предполагается в остальных параграфах главы 4.



Рисунок 4.16. Структура с КТ на крае ТИ, образованной барьерами конечных размеров $d_{1,2}$, в которой локализованные состояния имеют конечное время жизни. Области 1,3,5 вне барьеров отвечают волновым функциям вида (4.29), области 2,4 внутри барьеров отвечают комбинациям функций вида (4.30), (4.31) [151].

Структура волновых функций в областях 1-5 на рис.4.16 такая же, как и в модели с непроницаемыми барьерами, изложенной в п.4.1. Так, области 1,3,5 вне барьеров отвечают волновым функциям вида (4.29), а области 2,4 внутри барьеров отвечают комбинациям функций вида (4.30), (4.31). Если мы интересуемся решением задачи с граничными условиями вида (4.27), то мы придём к системе линейных однородных уравнений, в которых будет десять коэффициентов и восемь уравнений, соответственно числу областей (пять) на рис.4.16 и числу границ между барьерами и свободной от них областью (четыре), умноженных на две компоненты спинорной волновой функции. Таким образом, у нас остаётся два свободных коэффициента, которые мы обозначим как $C_{2,3}$. Поскольку нас интересует решение для квазистационарных состояниям, отвечающее только уходящим из области КТ волнам, но не приходящим в неё [27], [3], соответствующая пара коэффициентов $C_{1,5}$ для решений вида (4.29) с проекциями волнового вектора $k_v>0$ в области 1 и $k_v<0$ в области 5 должны быть равны нулю:

$$\begin{cases} C_1(C_2, C_3, \widetilde{E}) = 0, \\ C_5(C_2, C_3, \widetilde{E}) = 0. \end{cases}$$
(4.51)

В (4.51) \tilde{E} есть энергия квазистационарного состояния. Система (4.51) является линейной однородной системой уравнений на коэффициенты $C_{2,3}$. Условием существования нетривиального решения является обращение её определителя в нуль:

$$\Delta(\widetilde{E}) = 0. \tag{4.52}$$

Решения характеристического уравнения (4.52) для барьеров с конечной проницаемостью описываются комплексными значениями энергии, мнимая часть Γ которых отвечает обратному времени жизни квазистационарного состояния, которое есть $\tau = \hbar/(2\Gamma)$ [27], [3]:

$$\widetilde{E} = \operatorname{Re}E - i\Gamma. \tag{4.53}$$

Естественной единицей измерения Г в нашей модели с гамильтонианом (4.21) является величина

$$\Gamma_0 = A/2L, \tag{4.54}$$

которая для структуры на основе HgTe с шириной КТ *L*=40 нм равна 4.5 мэВ.

Рассмотрим пример зависимости Г от ширины барьеров с одинаковым линейным размером $d_1 = d_2 = d$ с одинаковой высотой M = 20 мэВ, для которых в параллельной ориентации намагниченности $\theta_1 = \theta_2 = 0$ случае В пределе формируется непроницаемых барьеров два дискретных уровня $E_{1,2} = \mp 9.62$ мэВ. Обратное время жизни, или уширение уровня Γ , для них является одинаковым. Поскольку обычно Г зависит от ширины барьера d экспоненциальным образом, целесообразно рассматривать зависимость $\ln(\Gamma/\Gamma_0)$, которая показана на рис.4.17(а).



Рисунок 4.17. Зависимость обратного времени жизни квазистационарного состояния в виде $\ln(\Gamma/\Gamma_0)$ от ширины барьеров d для (а) параллельно ориентированной намагниченности барьеров $\theta_1=\theta_2=0$ с одинаковой высотой M=20 мэВ, полученная при решении характеристического уравнения (4.52) (линия A), при решении задачи о рассеивании на двухбарьерной структуре в рамках зависимости (4.55) (линия B), и при использовании приближения (4.56) (линия C). (b) То же для различных ориентаций намагниченности и высоты барьеров, найденное при решении уравнения (4.52): линия A повторяет линию A на панели (а), линии B и C отвечают уширению уровней $E_0=0$ и $|E_{1,2}|=18.1$ мэВ для антипараллельной намагниченности барьеров $\theta_1=0$, $\theta_2=\pi$, линия D отвечает случаю параллельной намагниченности $\theta_1=\theta_2=0$ барьеров с различной высотой $M_1=20$ мэВ и $M_2=10$ мэВ [151].

На рис.4.17(а) показана зависимость $\ln(\Gamma/\Gamma_0)$ от d, полученная тремя различными способами. Первому из них, описанный выше, т.е. решению характеристического уравнения (4.52), отвечает линия А, второму, описанному ниже при решении задачи о рассеивании на двухбарьерной структуре в рамках зависимости (4.55), отвечает линия В, а третьему, заключающемуся в применении описанного ниже приближения (4.56), отвечает линия С. Можно видеть, что все приближения дают близкие результаты в области ширины барьера d>40 нм, которая и представляет интерес для приложений. На панели (b) рис.4.17 показана зависимость $\ln(\Gamma/\Gamma_0)$ от *d* для различных ориентаций намагниченности и высоты барьеров, найденная по первому способу при решении уравнения (4.52): линия А повторяет линию А на панели (а), линии В и С отвечают уширению уровней $E_0=0$ и $|E_{1,2}|=18.1$ мэВ для антипараллельной намагниченности барьеров $\theta_1=0$, $\theta_2=\pi$ (см. спектр на рис.4.7), линия D отвечает случаю параллельной намагниченности $\theta_1 = \theta_2 = 0$ барьеров с различной высотой $M_1=20$ мэВ и $M_2=10$ мэВ. Можно видеть, что для достаточно широких барьеров с d>100 нм обратные времена жизни всех состояний для различных конфигураций магнитных барьеров, показанные на рис.4.17, лежат в интервале (5·10⁻⁴...1·10⁻⁵) мэВ, что отвечает времени жизни т=0.6...29 нс. Ниже в п.4.5 мы увидим, что характерное время управления заселённостями состояний дискретных уровней в нашей модели в периодическом электрическом поле составляет интервал (4...11) пс, т.е. на три порядка меньше. Это означает, что при использовании магнитных барьеров с разумной шириной d>100 нм их можно считать на рассматриваемых интервалах времени манипуляции практически непроницаемыми, не учитываю конечность времени жизни квазистационарных состояний.

Упомянем ещё два подхода для оценки времени жизни квазистационарных состояний [14], [218], [20]. Первый из них связан с вычислением энергетической зависимости коэффициента прохождения T(E) через двухбарьерную структуру с коэффициентами прохождения $D_{1,2}$ изолированных барьеров, для которой справедливо выражение

$$T(E) = \frac{4|D_1 D_2|^2}{\left(|D_1|^2 + |D_2|^2\right) 1 + \left((E - E_n)/\Gamma\right)^2}.$$
(4.55)

В (4.55) Γ есть величина уширения квазистационарного состояния, формирующегося на стационарном уровне E_n , существующем в пределе непроницаемых барьеров между ними. Таким образом, решая задачу рассеивания, можно с помощью формулы (4.55) оценить величину уширения уровня Γ , что и показано на рис.4.17(а) линией В. Можно видеть, что подход (4.55) даёт очень близкие результаты с остальными двумя методами (линии A и C) для барьеров ширины d>40 нм. Второй подход связан с аналитической оценкой уширения уровня, исходя из знания коэффициентов прохождения $D_{1,2}$ для изолированных барьеров [14]:

$$\Gamma = \Gamma_0 \frac{L}{\widetilde{L}} \left(\frac{D_1 |^2 + |D_2|^2}{2} \right), \tag{4.56}$$

где Γ_0 определено в (4.54), а скорректированная длина \tilde{L} учитывает зависимость фазы $\varphi_{1,2}$ коэффициентов $D_{1,2}$ от волнового вектора:

$$\widetilde{L} = L + \frac{1}{2} \frac{d(\varphi_1 + \varphi_2)}{dk}.$$
(4.57)

Для коэффициента *D*₁ изолированного барьера энергетическая зависимость может быть без труда найдена аналитически:

$$\left|D_{1}(E)\right|^{2} = \frac{M^{2} - E^{2}}{M^{2} \operatorname{ch}^{2}(\gamma L) - E^{2}},$$
(4.58)

где γ определено в (4.26). Полученная с помощью (4.56)-(4.58) оценка зависимости $\ln(\Gamma/\Gamma_0)$ от *d* показана в виде линии C на рис.4.17(а). Видно, что эта оценка, как и оценка с помощью формулы (4.55) (линия B на рис.4.17(а)) находятся в хорошем согласии с расчётом времени жизни квазистационарного состояния, следующем из характеристического уравнения (4.52) (линия A на рис.4.17(а)).

Подводя итого этого параграфа, можно сделать вывод, что рассчитанное тремя способами время жизни квазистационарных состояний между двумя

магнитными барьерами конечной проницаемости, показанное на рис.4.17, показывает сходные результаты, отвечающие интервалу т=0.6...29 нс для барьеров с шириной d>100 нм, что на три порядка превышает время манипулирования заселённости дискретных уровней в электрическом поле, рассматриваемое в следующем параграфе. Изготовление магнитов с такими или большими линейными размерами представляется осуществимым, причём для более крупных магнитных барьеров будет время жизни расти по экспоненциальному закону. Это даёт основание считать рассматривать формируемые состояния как стационарные на рассматриваемых временах эволюции их заселённости, что дополнительно обосновывает модель спектра со стационарными локализованными состояниями между широкими магнитными барьерами, развитую в п.4.1 данной главы.

4.5. Динамика заселённости и спиновой плотности для состояний дискретного спектра в КТ в присутствии периодического электрического поля с учётом состояний континуума

4.5.1. Модель и основные параметры

В этом параграфе мы рассмотрим задачу об эволюции краевых состояний в периодическом электрическом поле [44] для одиночной КТ ширины L=40 нм, образованной двумя полубесконечными магнитными барьерами высоты М=20 мэВ с параллельной ориентацией намагниченности $\theta_1 = \theta_2 = 0$, рассмотренных в п.4.1. Для таких параметров в КТ формируется два дискретных уровня E_1 =-9.62 мэВ и E_2 =9.62 мэВ, энергия которых отсчитывается от точки Дирака E=0 в спектре краевых состояний. Помимо этих двух состояний с волновыми функциями (4.29)-(4.31) будут учитываться состояния непрерывного спектра (4.39)-(4.41), описанные в п.4.1.4, имеющие энергию |E| > M. Периодические граничные условия (4.42)для состояний непрерывного спектра будут реализовываться на длине структуры 2d, где d=150 L, что отвечает длине 2d=12 мкм, согласующейся с размерами экспериментально исследуемых структур

на базе ТИ. Для такой модели континуума мы имеем плотность состояний порядка 10^3 на интервал энергии 100 мэВ вокруг точки E=0, который перекрывает весь интервал энергий при рассматриваемых примерах эволюции. Схема структуры вместе с ориентацией электрического поля $\vec{F}(t) = (0, F(t), 0)$, где $F(t)=|e|\mathcal{E}(t)$ есть величина электрического поля, измеряемая в мэВ/нм, показана на рис.4.18. Поскольку при низкой температуре состояния ниже уровня Ферми $E_F=0$ будут заняты, мы будем рассматривать переходы в верхнюю половину свободных состояний континуума при E>M.



Рисунок 4.18. (а) Схема квантовой точки (КТ), сформированной магнитными барьерами высоты M и помещённой в переменное электрическое поле (0, F(t), 0). Намагниченность барьеров показана горизонтальными стрелками. Края структуры вдоль оси Oy ограничены только размерами рисунка. (б) Расположение дискретных уровней $E_{1,2}$ и состояний континуума E_{cont} . Электрическое поле с частотой ω вызывает переходы между парой уровней $E_{1,2}$ и между E_2 и состояниями континуума с энергией $E_{\text{cont}} > M$. Положение уровня Ферми $E_F=0$ [44].

Гамильтониан задачи имеет вид

$$H=H_0+Fy\sin\omega t, \qquad (4.59)$$

где H_0 есть гамильтониан краевых состояний (4.21), а $F=|e|\mathcal{E}$ есть амплитуда электрического поля, частота которого удовлетворяет условию резонанса

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 \tag{4.60}$$

между двумя дискретными уровнями на рис.4.18(б). Кроме того, с верхнего уровня E_2 возможны переходы в непрерывный спектр. Можно назвать резонанс (4.60) спиновым, поскольку спиновые проекции S_x для состояний дискретного спектра $E_{1,2}$ имеют противоположные значения. Для выбранных параметров задачи $\hbar \omega$ =19.24 мэВ, что отвечает частоте поля ω =2.93·10¹³ с⁻¹ (линейная частота f=4.66 ТГц), при этом период поля T=0.21 пс. Такие высокие частоты возбуждения в ТГц области имеют то преимущество, что явления ЭДСР, связанные со сменой заселённостей дискретных уровней, занимают короткий интервал времени. В рассматриваемых в этом параграфе примерах они протекают на временах порядка 16 T... 50 T в зависимости от амплитуды поля, т.е. на коротком интервале от 3.4 до 10.5 пс. Это позволяет пренебрегать эффектами релаксации и декогерентности, и в случае экспериментальной реализации подобной структуры позволяет рассчитывать на её высокое быстродействие и стабильность.

способе Следует остановиться на включения периодического электрического поля в гамильтониан задачи. В используемом нами варианте (4.59), как и в схожих по постановке задачах главы 2 о динамике в КT, используется полупроводниковых скалярный потенциал. Включение однородного в пространстве, но переменного во времени (т.е. рассматриваемого в квазистационарном приближении) электрического поля в гамильтониан может осуществляться при помощи как скалярного, так и векторного потенциала. В применении к краевым состояниям в ТИ и подобных им структурам используются оба подхода. Так, в нашей работе [147], описанной ниже в п.4.6, использовался скалярный потенциал, в работе [232] о графене использовался только векторный потенциал, а в работах [88], [89] учитывались вклады и от скалярного, и от векторного потенциалов. Покажем, что переход от скалярного к векторному потенциалу, приводящий к появлению спинового оператора σ_z в гамильтониане, не изменяет матричный элемент, отвечающий за частоту Раби для переходов между двумя дискретными уровнями в нашей системе. При использовании $\overline{A}(t)$ векторного потенциала включение переменного В гамильтониан

электрического поля $\vec{F}(t) = -\partial \vec{A}(t)/c\partial t$ осуществляется путём обычной подстановки $\vec{k} \rightarrow \vec{k} - e\vec{A}/\hbar c$ в слагаемом гамильтониана $Ak_y\sigma_z$. Для нашей задачи с гамильтонианом (4.21) и периодическим электрическим полем вдоль оси *Oy* с компонентой *Fy* sin ωt мы получаем после такой подстановки оператор возмущения V_1 в следующей форме, нормированной на амплитуду электрического поля *F*, измеряемую у нас в мэВ/нм:

$$\frac{V_1(t)}{F} = -\frac{A}{\hbar\omega}\sigma_z \cos\omega t, \qquad (4.61)$$

где для ТИ на базе HgTe/CdTe A=360 мэВ·нм, а частота ω удовлетворяет условию резонанса (4.60). В такой форме возмущение от электрического поля содержит спиновый оператор σ_z и не содержит оператора координаты, как в калибровке со скалярным потенциалом, применявшейся в гамильтониане (4.59), для которой оператор возмущения $V_2(t)$ имеет вид

$$\frac{V_2(t)}{F} = y\sin\omega t \,. \tag{4.62}$$

В правой части обоих операторов (4.61) и (4.62) стоят величины, имеющие размерность координаты, поэтому матричные элементы данных операторов без временного множителя можно обозначить как

$$y_{mn}^{(1)} = y_0 (\sigma_z)_{mn}, \quad y_{mn}^{(2)} = y_{mn}.$$
 (4.63)

В первом из выражений (4.63) амплитуда *y*₀=*A*/ħω по порядку величины совпадает со значением, получаемым из интегрирования на одном периоде поля по времени для оператора скорости

$$v_{y} = \frac{\partial H}{\hbar \partial k_{y}} = \frac{A\sigma_{z}}{\hbar}$$
(4.64)

в гамильтониане (4.21). Величина y_0 определяет характерный масштаб осцилляций среднего значения координаты для динамики в базисе краевых состояний. Таким образом, оба подхода в выражении (4.63) как со скалярным, так и с векторным потенциалом приводят к одному и тому же набору характерных амплитуд для возмущения от электрического поля. Количественное

сопоставление двух выражений в (4.63) для матричных элементов между двумя дискретными уровнями Е_{1,2} приводит к следующему результату. Для матричного элемента координаты во втором равенстве в (4.63) мы нашли численно, что $|y^{(2)}_{12}| = 13.19$ нм. Для оценки первого выражения в (4.63) нам необходимо значение у₀, равное для параметров нашей задачи 18.71 нм, и значение матричного элемента оператора спина σ_z. Численные расчёты показывают, что для пары дискретных уровней при выбранных параметрах задачи |(σ_z)₁₂|=0.705, что согласно (4.63) даёт значение модуля матричного элемента $|y^{(1)}_{l2}| = 13.19$ нм, т.е. совпадающее с полученным из калибровки со скалярным потенциалом. Совпадение результатов подходов с оператором спина и координаты не является случайным, поскольку оператор скорости (4.64) для гамильтониана (4.21) пропорционален оператору спина о_z, т.е. динамика координаты и *z*-проекции спина тесно связаны. Мы полагаем, что найденное хорошее согласие между двумя подходами позволяет использовать при исследовании осцилляций Раби любой из них, что обосновывает применение скалярного потенциала для описания переменного во времени и однородного в пространстве электрического поля в гамильтониане (4.59).

4.5.2. Результаты моделирования эволюции заселённостей и средних значений

4.5.2.1. Эволюция заселённостей

Как и в главе 2, волновую функцию во внешнем поле мы будем искать в виде ряда по собственным функциям $\psi_n(y)$ гамильтониана (4.21), включая состояния непрерывного спектра:

$$\Psi(y,t) = \sum_{n} C_{n}(t) \exp\left(-i\frac{E_{n}t}{\hbar}\right) \cdot \psi_{n}(y).$$
(4.65)

После подстановки (4.65) в нестационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (4.59) мы получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $C_n(t)$ с начальным условием $C_n(0)=\delta_{n1}$, отвечающим нахождению электрона на нижнем уровне E_1 дискретного спектра в

КТ. Следует отметить, что формально ряд (4.65) по собственным функциям должен содержать бесконечный набор базисных функций, однако в реальности при не слишком больших амплитудах электрического поля в динамику оказывается вовлечена только часть состояний континуума, непосредственно примыкающая к дискретным уровням в нижней части спектра. Наши расчёты показали, что в полях с амплитудой F=0.03 ... 0.09 мэВ/нм на временах $t \le 150 \ T$, существенных для рассматриваемых эффектов, в динамике активно участвуют состояния континуума с энергией не выше 30 мэВ. Мы включали в численные расчёты все состояния континуума с энергией до 100 мэВ и применяли при моделировании унитарной эволюции схему Кэли [25], [36], что обеспечивало сохранение нормы волновой функции. После получения решения (4.65) в данный момент времени в виде набора коэффициентов $C_n(t)$ с их помощью могут быть определены все интересующие нас средние значения и локальные плотности, которые будут рассмотрены в следующих разделах.

Мы рассматривали эволюцию в периодическом электрическом поле с гамильтонианом (4.59) при четырёх значениях напряжённости поля: F=0.03, 0.05, 0.07, 0.09 мэВ/нм, на временах t \leq 150 *T*, где *T*=0.21 пс есть период электрического Такой интервал времени, занимающий около 32 пс, оказывается поля. достаточным для наблюдения основных явлений, проистекающих от эволюции заселённости дискретной и непрерывной частей спектра. Рассмотрим вначале эволюцию заселённости дискретных уровней, для которых в начальный момент времени $C_1(0)=1, C_2(0)=0$. На рис.4.19(а) приведён пример эволюции заселённости нижнего дискретного уровня $|C_1(t)|^2$ (сплошная линия) и $|C_2(t)|^2$ (штриховая линия) для амплитуды поля F=0.05 мэВ/нм. Можно видеть, что заселённости уровней испытывают характерные осцилляции, которые для строго двумерной системы называются осцилляциями Раби. Для F=0.05 мэВ/нм период таких осцилляций T_R, определяемый как расстояние между максимумами заселённости, равен примерно 30 Т, что составляет 6.3 пс. Кроме того, на рис.4.19(а) заметно затухание амплитуды осцилляций со временем, что отражает переходы в состояния Из рис.4.19(а) можно непрерывного спектра. сделать вывод. что при

рассматриваемых параметрах задачи можно осуществить смену заселённостей на масштабе нескольких T_R , когда уход в континуум ещё не проявляется заметно.



Рисунок 4.19. (а) Динамика заселённости $|C_{1,2}(t)|^2$ дискретных уровней при резонансе (4.60) для напряжённости поля *F*=0.05 мэВ/нм. Видны осцилляции заселённости с периодом около 30 *T* (6.3 пс), амплитуда которых затухает вследствие развития переходов в непрерывный спектр. (б) Зависимость частоты осцилляции заселённостей дискретных уровней Ω/ω (частоты Раби) от амплитуды поля *F*. Численные результаты, отмеченные кружками, хорошо соответствуют приближению (1.15), показанному сплошной линией [44].

Зависимость частоты осцилляций заселённостей уровней $|C_{1,2}(t)|^2$, или частоты Раби $\Omega=2\pi/T_R$ в строго двухуровневой модели с состояниями в приближении вращающейся волны (быстрые осцилляции на удвоенной частоте поля отбрасываются) имеет простой линейный вид (1.15) как функция амплитуды электрического поля *F*. На рис.4.19(б) кружками изображена численная зависимость частоты Ω в единицах ω для смены заселённостей уровней E_1 и E_2 , полученная для рассматриваемых амплитуд электрического поля. Значения периода T_R составляет от 50 *T* для *F*=0.03 мэВ/нм до 16 *T* для *F*=0.09 мэВ/нм, т.е. от 10.5 до 3.4 пс. Численные результаты хорошо согласуется с линейной зависимостью (1.15), показанной сплошной линией. Для неё использовано численно определённое значение матричного элемента координаты между двумя дискретными уровнями E_1 и E_2 , модуль которого для наших параметров $|y_{12}|=13.19$

нм. Достаточно хорошее совпадение с линейной зависимостью имеет место несмотря на участие в динамике многих уровней континуума. В этом состоит одно из отличий задачи с безмассовым спектром и однофотонным резонансом (4.60)квантовой точкой с состояниями континуума OT задач с В полупроводниковой нанопроволоке, рассмотренных в главе 2, где зависимость частоты Ω от амплитуды поля имеет существенно нелинейный характер. Анализ рис.4.19 приводит к очевидному выводу, что при увеличении амплитуды поля F процесс смены заселённостей протекает быстрее, однако при этом ускоряется и уход в состояния континуума, который будет рассмотрен ниже. Следовательно, в приложениях многоуровневой системы с учётом состояний практических выбирать некоторый континуума необходимо оптимальный интервал электрических полей, определение которого составляет одну из целей данной работы.

4.5.2.2. Вероятность ухода в континуум

Взаимодействие состояний дискретной и непрерывной части спектра в присутствии периодического электрического поля приводит росту К заселённостей состояний заселённости континуума уменьшению И немногочисленных дискретных уровней. Другими словами, электрон, первоначально находящийся В связанном состоянии, под действием периодического поля уходит в континуум, т.е. происходит ионизация квантовой точки, подобно тому, как это было в задаче о КТ в полупроводниковой нанопроволоке, рассмотренной в п.2.6 главы 2. Мы начнём с анализа численных результатов для суммарной заселённости двух дискретных уровней в нашей модели, определяемой как

$$P_{loc}(t) = |C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2.$$
(4.66)

На рис.4.20 сплошными линиями представлена зависимость (4.66) от времени для выбранных амплитуд электрического поля, полученные при численным расчёте эволюции. Штриховые линии описывают аналитическое приближение, которое будет рассмотрено далее.

323



Рисунок 4.20. Эволюция суммарной заселённости дискретных уровней (4.66), полученная численным расчётом (сплошные линии) и в рамках аналитического приближения (4.67) (штриховые линии), построенная для различных амплитуд электрического поля (A) *F*=0.03 мэВ/нм, (B) *F*=0.05 мэВ/нм, (C) *F*=0.07 мэВ/нм, (D) *F*=0.09 мэВ/нм [44].

Для получения аналитического приближения будем аппроксимировать зависимость (4.66) на рис.4.19 экспоненциальной кривой

$$P_{loc}(t) = P_0 \exp(-w(F) \cdot t),$$
 (4.67)

где начальная вероятность $P_0=1$, а вероятность перехода в единицу времени w(F) с уровня E_2 дискретного спектра в состояния континуума мы оценим с помощью золотого правила Ферми с возмущением $Fy \sin \omega t$ в гамильтониане (4.59):

$$w(F) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| F y_{if} \right|^2 \delta \left(E_f - E_i - \hbar \omega \right), \tag{4.68}$$

где значение матричного элемента y_{if} определяется по собственным функциям гамильтониана (4.21), а дельта-функция в (4.68) аппроксимируется соответствующей плотностью состояний, определяемой по численно найденному спектру гамильтониана (4.21). Результаты применения выражения (4.67) для использованного в расчётах набора амплитуд электрического поля приведены на рис.4.20 в виде штриховых линий того же цвета, что сплошные линии для численного расчёта. Видно, что соответствие численных и аналитических
результатов весьма хорошее. Характерные времена ухода в континуум, определяемые согласно (4.68) как $\tau=1/w(F)$, составляют от 633 *T* при *F*=0.03 мэВ/нм до 70 T при *F*=0.09 мэВ/нм, т.е. от 133 до 15 пс. Эти времена, хотя и позволяют осуществить требуемые операции по смене заселённостей дискретных уровней, рассмотренные в предыдущем пункте, являются всё же достаточно короткими на масштабе быстродействия современных электронных приборов.

Квадратичный рост w(F) в (4.68) по сравнению с линейным ростом частоты Раби (1.15) говорит о том, что для удержания электрона в связанном состоянии на уровне E_1 или E_2 в течение достаточно долгого времени не следует прикладывать к структуре слишком сильное электрическое поле. С другой стороны, слишком слабые поля также не представляются подходящими, поскольку частота Раби заселённостей при этом падает, (1.15)для смены характерное время "переключения" между двумя дискретными уровнями растёт, и наступившие эффекты релаксации и декогерентности приведут к усложнению и подавлению желаемой динамики заселённостей. Поэтому увеличивать амплитуду электрического поля выше рассмотренных в наших примерах значений представляется нецелесообразным. Уменьшение амплитуды приведёт к росту времени ухода в континуум согласно аппроксимации (4.68) как $\tau \sim 1/F^2$. Однако, при слишком слабых полях сами операции по смене заселённостей дискретных уровней (осцилляции Раби) будут протекать медленнее, в соответствии с (1.15), К активному влиянию эффектов что может привести релаксации И декогерентности, характерный масштаб которых по времени начинается для типичных наноструктур от одной наносекунды и выше.

Зависимость w(F), как это следует из (4.68), имеет вид $w \sim F^2$, что в рассматриваемом сравнительно узком интервале электрического поля 0.03...0.09 мэВ/нм находится в неплохом согласии с экспоненциальной зависимостью (2.79) из главы 2 для режима нелинейной многофотонной ионизации. Для иллюстрации рассмотрим рис.4.21, где красная кривая $f_1(F)$ построена для экспоненциального по *F* выражения (2.79), а синяя кривая $f_2(F) - для$ квадратичного по *F* золотого

правила Ферми (4.68). Видно, что степень согласованности обоих выражений растёт с ростом напряжённости поля.



Рисунок 4.21. Сравнение экспоненциальной скорости ионизации (2.79) (красная кривая f_1) и квадратичной аппроксимации по золотому правилу Ферми (4.68) (синяя кривая f_2) для параметров рис.4.20 в показанной на нём области значений напряжённости электрического поля F=0.03...0.09 мэВ/нм.

Приведённые здесь и в предыдущем пункте оценки показывают, что для нашей структуры возможно осуществить операции типа осцилляций Раби на коротком масштабе от 4 до 11 пс. При этом уход в континуум начнёт проявлять себя на временах от 15 до 133 пс соответственно, что позволит осуществить такие операции до наступления существенной вероятности ухода электрона в непрерывный спектр.

4.5.2.3. Эволюция средних значений энергии, спина и координаты

Ещё одним инструментом для определения преимущественного вклада в состояние электрона от дискретной или непрерывной части спектра является анализ динамики средних значений физических величин. Под усреднением величины, описываемой оператором X, мы понимаем обычное квантовомеханическое усреднение в состоянии (4.65). Рассмотрим вначале поведение средней энергии $\langle E(t) \rangle$ со временем, показанное на рис.4.22 для тех же

амплитуд электрического поля, что на рис.4.20. В начальный момент времени электрон локализован на нижнем дискретном уровне E_1 , поэтому $\langle E(0) \rangle = E_1$. В системе только с двумя дискретными уровнями без учёта континуума $\langle E(t) \rangle$ менялась бы в интервале $E_1 \leq \langle E(t) \rangle \leq E_2$, что показано на рис.5 горизонтальными линиями и метками $E_{1,2}$. Из графиков эволюции $\langle E(t) \rangle$ на рис.4.22 видно, что при учёте состояний континуума пределы изменения средней энергии существенно сдвигаются. Именно, для всех амплитуд поля имеет место рост среднего значения энергии, сопровождаемый осцилляциями, соответствующим осцилляциям Раби (см. рис.4.19). Характерное время превышения средней энергией порогового значения, равного высоте барьера M, отвечает времени $\tau=1/w(F)$ для затухания суммарной заселённости дискретных уровней (4.66), показанной на рис.4.20. Можно сказать, что в эволюцию средней энергии на рассматриваемом интервале времени дают основной вклад два дискретных уровня, но с течением времени состояния континуума начинают давать всё более заметный вклад, в особенности для максимальных амплитуд электрического поля.



Рисунок 4.22. Зависимость средней энергии $\langle E(t) \rangle$ от времени, построенная для таких же амплитуд электрического поля *F*, что на рис.4.20. Высота барьера *M*=20 мэВ вместе с энергиями дискретных уровней E_1 и E_2 [44].

Другую полезную информацию о динамике электронных состояний можно получить, анализируя эволюцию среднего значения координаты $\langle y(t) \rangle$, что использовалось нами ранее для задач о динамике в полупроводниковой нанопроволоке в главе 2. При этом необходимо отметить важное отличие системы с безмассовым гамильтонианом (4.21) от обычной задачи в приближении эффективной массы. Именно, для гамильтониана (4.21) вид оператора скорости (4.64) означает, что средняя скорость не может превышать амплитуды $v_0=A/\hbar$ и определяется динамикой среднего значения $\langle \sigma_z \rangle$, завися от амплитуды электрического поля лишь опосредованно. В периодическом поле на частоте ω осцилляции $\langle \sigma_z \rangle$ приводят к осцилляциям среднего значения координаты, амплитуду которых можно оценить как ωv_0 , что согласно (4.64) даёт нам оценку

$$y_0 \le A/\hbar\omega, \tag{4.69}$$

с которой мы уже сталкивались при сравнении (4.63) матричных элементов от оператора возмущения при использовании скалярного либо векторного потенциала. Вначале мы рассмотрим динамику $\langle \sigma_z \rangle$ для какого-то одного значения амплитуды поля *F*. На рис.4.23(а) показана зависимость от времени $\langle \sigma_z \rangle$ (в единицах $\hbar/2$) для *F*=0.05 мэВ/нм. Можно наблюдать как быстрые осцилляции на частоте поля ω , так и более медленные осцилляции огибающей, период которой отвечает половине периода осцилляций Раби *T_R*, показанных на рис.4.19(а), т.е. времени смены заселённостей двух дискретных уровней. На рис.4.23(б) показан график $\langle y(t) \rangle$ для того же значения *F*. Видно, что осцилляции $\langle y(t) \rangle$ следуют за осцилляциями $\langle \sigma_z \rangle$ согласно соотношению (4.64). Амплитуда осцилляций *y*₀ согласно оценке (4.69) не должна превышать для наших параметров значения *y*₀=19 нм, что, как видно на рис.4.23(б), находится в хорошем согласии с численными результатами.

Для описания динамики в координатном пространстве наряду с эволюцией среднего значения координаты целесообразно рассмотреть и поведение среднего квадратичного уклонения $\Delta y(t) = \sqrt{\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2}$,

определяющего характерную ширину волновой функции. На рис.4.23(в) показана зависимость Δ*y* для всех четырёх амплитуд поля, рассматриваемых в данной

зависимость Δy для всех четырёх амплитуд поля, рассматриваемых в данной работе. Можно видеть, что Δy показывает рост от начального значения L/2, отмеченного на графике горизонтальной чертой, до значений порядка 3000\$ нм, т.е. происходит расплывание начального состояния вдоль края топологического изолятора. Максимальное значение Δy на рис.4.23(в) почти линейно зависит от амплитуды электрического поля F, что отражает возрастание вклада от состояний континуума в волновую функцию (4.65) с возрастанием амплитуды поля, которая входит линейно в нестационарный гамильтониан (4.59). Характерное время достижения максимума Δy на рис.4.22(в) можно сопоставить со пороговым временем пересечения средней энергией на рис.4.22 границ интервала $E_1 \leq \langle E(t) \rangle \leq E_2$, что отвечает нарастанию заметного вклада состояний континуума в полную волновую функцию. Необходимо сделать следующие пояснения относительно результатов на рис.4.23. Наличие осцилляций для $\langle y(t) \rangle$ и для соответствующей компоненты скорости, т.е. проекции спина $\langle \sigma_z(t) \rangle$ согласно (4.64). вместо постоянного тока для краевого состояния, являющегося собственной функцией гамильтониана $H_{1D}=Ak_v\sigma_z$ без барьеров, обусловлено двумя обстоятельствами. Во-первых, это принятое нами приближению бесконечно широких барьеров, что отвечает функционированию всей системы "квантовая точка плюс барьеры" в "запертом" режиме. Во-вторых, это периодическое во времени электрическое поле в гамильтониане (4.59), не вызывающее постоянный ток с определённой направленностью в пространстве, а приводящее лишь к осцилляциям скорости и расплыванию начального состояния, как это видно из рис.4.23. При этом локальная плотность тока в какой-либо точке вне области конфайнмента может иметь отличное ОТ нуля среднее значение на рассматриваемом интервале времени, что будет отражать процесс покидания электроном области квантовой точки. В следующем пункте мы рассмотрим зависимость усреднённой по времени локальной плотности тока в данной точке вне области конфайнмента как функции амплитуды электрического поля.



Рисунок 4.23. Зависимости от времени (а) среднего значения проекции спина $\langle \sigma_z \rangle$ и (б) среднего значения координаты $\langle y(t) \rangle$ для амплитуды поля *F*=0.05 мэВ/нм. Амплитуда осцилляций $\langle y(t) \rangle$ находится в согласии с поведением $\langle \sigma_z \rangle$ и оценкой (4.69). Частота быстрых осцилляций соответствует частоте поля ω , период медленных осцилляций огибающей отвечает половине периода $T_R/2$ осцилляций Раби, показанных на рис.4.19(а). (в) Зависимость от времени среднеквадратичного уклонения Δy для различных амплитуд поля. Рост Δy продолжается от начального значения L/2 до максимального значения, пропорционального амплитуде поля *F* [44].

330

Ещё одно важное замечание касается взаимоотношений между спадающей во времени суммарной вероятностью заселённости дискретных уровней (4.66) и растущим Δy на рис.4.23(в). Значительное уширение профиля волновой функции, что выражается в возрастании $\Delta y(t)$, обусловлено растущим со временем вкладом состояний непрерывного спектра, которые делокализованы на всём масштабе нашей структуры, т.е. на области 2d=12 мкм. Следовательно, даже небольшая примесь состояний континуума, когда величина (4.66) в начале эволюции на рис.4.23 ещё не сильно уменьшилась по сравнению с единицей, может дать заметный рост Δy на рис.4.23(в). При этом максимум электронной плотности попрежнему будет сосредоточен в области квантовой точки на тех временах $t < \tau$, где время ухода в континуум $\tau \sim 1/w(F)$, а w(F) оценивается согласно (4.68). Кроме того, среднее значение координаты, т.е. "центр тяжести" электронной волновой функции, как это видно на рис.4.22(б), всё время эволюции остаётся в области между барьерами. Это также будет проиллюстрировано в следующем разделе при построение графика плотности вероятности, на котором будет видно, что основная с точки зрения вклада в норму часть волновой функции находится в начале эволюции между барьерами. В итоге на временах *t*<т даже при расплывании волновой функции, как мы полагаем, можно рассчитывать на осуществление операций с двухуровневой частью спектра, требуемых для создании кубита.

4.5.3. Распределения плотности в пространстве и плотность тока вероятности 4.5.3.1. Эволюция распределений плотности

Для экспериментального и практического применения обсуждаемых эффектов важное значение имеет эволюция не только средних значений, но и локальных плотностей соответствующих физических величин. Прежде всего, это плотность заряда, т.е. плотность вероятности $|\Psi(y,t)|^2$, и плотность спиновой проекции $S_i(y,t)$, i=x,y,z (в единицах $\hbar/2$), определяемой в состоянии (4.65) как $S_i(y,t)= \Psi^+(y,t) \sigma_i \Psi(y,t)$. Мы рассмотрим пример эволюции $|\Psi(y,t)|^2$ и компоненты спиновой плотности $S_x(y,t)$ в области, примыкающей к квантовой точке и занимающей пространственный интервал -3L/2<y<3L/2 для наиболее сильного электрического поля *F*=0.09 мэВ/нм на начальном этапе эволюции при $0 \le t \le 30T$. На рис.4.24 приведены контурные графики вида f(y,t) = Cдля (а) плотности вероятности и (б) компоненты спиновой плотности S_x. Можно выделить несколько особенностей для эволюции плотности, которые качественно присутствуют и при других значениях амплитуды электрического поля F. Вопервых, наблюдаются мелкомасштабные быстрые осцилляции на частоте электрического поля ω , подобные осцилляциям $\langle y(t) \rangle$, рассмотренным в предыдущем пункте. Во-вторых, наблюдаются крупномасштабные медленные осцилляции с периодом, соответствующим смене заселённостей дискретных *E*₁ и *E*₂ с частотой Раби. Нам представляется важной следующая уровней особенность эволюции плотности S_x , заметная на рис.4.24(б): заселённость уровня E_1 со знаком спиновой плотности $S_x > 0$ сменяется на временах порядка T_R заселённостью уровня E_2 с другим знаком спиновой плотности $S_x < 0$. Это связано с противоположным знаком проекции S_x для состояний двух дискретных уровней. Данная особенность может иметь значение для экспериментального детектирования явления осцилляций Раби в данной системе, т.к. смена знака проекции спиновой плотности может быть обнаружена магнитным зондом, находящимся в непосредственной близости от квантовой точки. Наконец, третья особенность графиков на рис.4.24 состоит в том, что с течением времени амплитуда обеих плотностей в области КТ постепенно затухает, что на рассматриваемом масштабе времени лучше заметно для спиновой плотности. Это связано с переходами в непрерывный спектр, сопровождающимися нарастающей делокализацией волновой функции. Мы обсудим интенсивность такой делокализации в следующем пункте при расчёте тока вероятности.



Рисунок 4.24. Эволюция распределений (а) плотности вероятности $|\Psi(y,t)|^2$ и (б) компоненты спиновой плотности $S_x(y,t)$ в периодическом электрическом поле с амплитудой F=0.09 мэВ/нм для области -3L/2 < y < 3L/2 на интервале 0 < t < 30T. Мелкомасштабные осцилляции отвечают частоте электрического поля ω . Интервал времени, на котором происходит смена знака S_x , отвечает периоду осцилляций Раби, при котором заселённость уровня E_1 с $S_x>0$ сменяется заселённостью уровня E_2 с $S_x<0$. С течением времени амплитуда обеих плотностей в области КТ испытывает затухание, что связано с переходами в непрерывный спектр, сопровождающимися нарастающей делокализацией волновой функции [44].

4.5.3.2. Плотность тока вероятности

области Для количественного описания интенсивности покидания квантовой точки при переходах в континуум помимо эволюции заселённости дискретных уровней (4.66) можно рассчитать плотность тока вероятности в некоторой точке вне области конфайнмента. Даже если полный ток через структуру равен нулю, т.е. система "квантовая точка плюс барьеры" находится в "запертом" режиме, ненулевой средний ток в конкретной точке вне области конфайнмента служит индикатором ухода в непрерывный спектр [12], [13]. Для нахождения плотности тока обратимся к оператору скорости (4.64), который пропорционален оператору проекции спина σ_z. Мы будем вычислять значение плотности тока в выбранной точке $y_1=3L/2$, т.е. вне области магнитных барьеров. Далее, надо учесть то обстоятельство, что в периодическом электрическом поле локальная плотность вероятности испытывает мелкомасштабные осцилляции на периоде поля, как это видно на рис.4.24(а), что отразится и на мгновенных значениях плотности тока. Чтобы определить среднюю плотность тока за всё время наблюдения $0 \le t \le NT$, где в наших расчётах число периодов поля N=150, мы выполним усреднение локальной плотности тока по этому интервалу, и после подстановки выражения (4.64) для оператора скорости будем вычислять величину

$$\left\langle j_{y}(y_{1})\right\rangle = \frac{A}{\hbar} \frac{1}{NT} \int_{0}^{NT} \Psi^{+}(y_{1},\tau) \sigma_{z} \Psi(y_{1},\tau) d\tau .$$

$$(4.70)$$

Результаты расчёта усреднённого тока (4.70), нормированного на скорость $v_0 = A/\hbar$ и полную длину краевой области 2*d*, показаны на рис.4.25.



Рисунок 4.25. Зависимость среднего значения локальной плотности тока вероятности (4.70) за период наблюдения 0<*t*<*NT* от амплитуды электрического поля *F* [44].

Можно выделить следующие особенности найденной усреднённой плотности тока (4.70). Во-первых, усреднение в (4.70) даёт ненулевое среднее значение плотности тока вероятности на рассматриваемом интервале времени 0<t<NT, что говорит о развитии процесса ухода электрона из области квантовой точки в континуум. Во-вторых, из рис.4.25 можно сделать вывод, что с ростом амплитуды поля F максимальное значение плотности тока, пропорциональное локальной спиновой плотности $S_{z}(y_{1}, t)$, растёт в зависимости от F по закону, близкому к линейному. Это находится в согласии с нашими предыдущими результатами о динамике средних значений проекций спина для локализованных состояний в полобной квантовой точке co многими дискретными уровнями [147], рассмотренной в следующем параграфе 4.6.

4.5.4. Выводы по п.4.5

Подводя итог параграфа 4.5, можно выразить надежду, что полученные результаты для эволюции плотностей вероятности, спиновых проекций, а также плотности тока могут быть экспериментально проверены с помощью техники локальных магнитных зондов и при детектировании электрического тока в областях как внутри, так и снаружи области квантовой точки. На временах, существенно меньших времени ухода в состоянию континуума, может быть реализована когерентная управляемая динамика заселённости в системе двух уровней в КТ, что может служить для создания на базе рассмотренной системы нового типа кубита.

4.6. Регулярная и нерегулярная динамика в широкой КТ на крае ТИ со многими дискретными уровнями в периодическом электрическом поле

4.6.1. Особенности спектра и начального состояния для эволюции

Представляет интерес рассмотреть динамику состояний в КТ на крае ТИ для случая, когда в КТ сформировано много дискретных уровней, значительная часть которых эффективно вовлекается в эволюцию [147]. Это позволит исследовать

вопрос о степени регулярности динамики, поскольку, как мы видели в п.2.4 главы 2, при наличии СОВ динамика в периодическом поле на начальном этапе является нерегулярной. В нашей модели с гамильтонианом (4.21) для локализованных краевых состояний, разумеется, есть отличия от модели в п.2.4: исходный спектр краевых состояний линеен по квазиимпульсу, т.е. является безмассовым, а сама КТ одномерная, а не двумерная. Тем не менее, основные черты порождающей нерегулярную динамику системы имеются: это большое число вовлекаемых в эволюцию уровней в системе с СОВ-подобным гамильтонианом, включающим связь квазиимпульса и спина. Мы считаем, что предпринятое в нашей работе [147] моделирование является одной из первых попыток увидеть проявления квантовой хаотической динамики в системе на базе ТИ.

В этом параграфе мы рассматриваем широкую КТ на крае КЯ HgTe/CdTe со следующими параметрами гамильтониана (4.21): ширина L=3 мкм, высота барьеров прежняя, $M_1=M_2=20$ мэВ, ориентация их намагниченности параллельная, $\theta_1=\theta_2=0$. В этих условиях характерное расстояние между уровнями гамильтониана (4.21), равное

$$\Delta E = \pi A/L, \tag{4.71}$$

составляет 0.38 мэВ, поэтому на масштабе высоты барьера *М*=20 мэВ в КТ формируется около 100 дискретных уровней.

В отличие от задач предыдущего п.4.5, в этом параграфе мы будем рассматривать начальное состояние не локализованным на каком-то одном дискретном уровне, а локализованном в форме волнового пакета на масштабе всей КТ. Это представляется оправданным, если в одноэлектронном режиме в область КТ инжектируется электрон, энергия которого не обязательно соответствует какому-либо дискретному уровню, которые в достаточно большом количестве (около 100) заполняют интервал энергий от -M до M. Величина высоты барьера M=20 мэВ, используемая также в предыдущих параграфах этой главы, представляется нам оптимальной, поскольку в КЯ HgTe/CdTe, в которых формируется TU, ширина запрещённой зоны в HgTe близка к 2M=40 мэВ [209]. Таким образом, начальное состояние представляет собой волновой пакет

$$\Psi(y,0) = \sum_{n} C_{n}(0)\psi_{n}(y), \qquad (4.72)$$

где разложение ведётся по состояниям (4.29)-(4.31) дискретного спектра. Примеры координатных профилей волновых пакетов, рассматриваемых нами, показаны на рис.4.26(а) для (1) широкого пакета с $\Delta y=1$ мкм и (2) узкого пакета с $\Delta y=0.1$ мкм. Выбрано среднее значение волнового числа пакета $\bar{k}_y = 0$, что не влияет на характер решения в смысле его регулярности или нерегулярности. Соответствующие распределения для вкладов базисных состояний $|C_n(0)|^2$ показаны на рис.4.26(б),(в). Можно видеть, что широкому пакету на панели (б) отвечает сравнительно узкий набор базисных функций, что приближает такое начальное условие к варианту п.2.4, в котором начальное состояние было одной из базисных функций. Напротив, узкому пакету на панели (в) отвечает широкий набор базисных функций, что позволяет рассмотреть такой предел для начального состояния.



Рисунок 4.26. (а) Координатный профиль широкого волнового пакета с $\Delta y=1$ мкм (кривая 1) и узкого пакета с $\Delta y=0.1$ мкм (кривая 2), рассматриваемых как начальное состояние в динамике для КТ со многими уровнями. (б), (в) Соответствующие распределения для вкладов базисных состояний $|C_n(0)|^2$ для профилей пакетов 1 и 2 [147].

Динамика будет рассматриваться нами по схеме, аналогичной применявшейся в п.4.5, когда гамильтониан (4.59) есть сумма стационарного вклада (4.21) и скалярного потенциала периодического электрического поля, который мы для данной задачи брали в виде $V(y, t) = F y \cos \omega_0 t$. Остальные особенности схемы расчёта эволюции совпадают с п.4.5, в частности, в силу периодического характера поля используется теория Флоке. Помимо численного расчёта, мы рассматривали аналитическое приближение в рамках квазиклассической динамики, о котором расскажем ниже.

4.6.2. Аналитические результаты для квазиклассической динамики

Мезоскопические размеры КТ (ширина L=3 мкм) и большое число дискретных уровней внутри неё (N~100), а также начальное состояние в виде волнового пакета, локализованного внутри КТ, позволяют применить для оценки квазиклассический подобно режимов динамики подход, TOMV как ΜЫ анализировали динамику в широкой двойной КТ в п.2.1 главы 2. В рамках этого подхода мы рассматриваем динамику среднего значения \overline{x} величины x(t), используя уравнение эволюции (2.5). Что касается формы волнового пакета, то в квазиклассическом пределе ширина распределения коэффициентов C_n(0) в гильбертовом пространстве состояний должна удовлетворять неравенству $\Delta n \ll \overline{n}$, что, строго говоря, выполняется для двух примеров начальных условий рис.4.26 узкого распределения на рис.4.26(б). на ЛИШЬ для Полный квантовомеханический расчёт, описанный в следующем пункте, приводит к квазиклассической оценкой, результатам, согласующимся с причём его результаты качественно схожи для узкого (в пространстве состояний) пакета на рис.4.26(б) и широкого пакета на рис.4.26(в).

Запишем уравнения эволюции $d\bar{x}/dt = (i/\hbar)[H,x]$ для среднего значения, где черта означает обычное квантовомеханическое усреднение по состоянию $\Psi(y, t)$, выбирая в качестве величины *x* следующий набор переменных, определяющих эволюцию координаты и спина: y(t), $k_y(t)$, $\sigma_x(t)$, $\sigma_y(t)$, $\sigma_z(t)$. Подставляя в качестве сумму $H_0 + Fy \cos \omega_0 t$, где H_0 есть стационарный гамильтониан (4.21), мы получим следующую систему уравнений для эволюции средних значений, в которой введена фермиевская скорость краевых состояний $v_F = A/\hbar$:

$$\begin{cases} \frac{d\,\bar{y}(t)}{dt} = v_F \,\bar{\sigma}_z(t), \\ \frac{d\,\bar{k}_y(t)}{dt} = \frac{\omega_b}{2} \frac{\partial F_b}{\partial y} \bar{\sigma}_x(t) - \frac{F}{\hbar} \cos \omega_0 t, \\ \frac{d\,\bar{\sigma}_x(t)}{dt} = -2 v_F \,\bar{k}_y(t) \,\bar{\sigma}_y(t), \\ \frac{d\,\bar{\sigma}_y(t)}{dt} = 2 v_F \,\bar{k}_y(t) \,\bar{\sigma}_x(t) + \omega_b \,F_b(y) \,\bar{\sigma}_z(t) \\ \frac{d\,\bar{\sigma}_y(t)}{dt} = -\omega_b \,F_b(y) \,\bar{\sigma}_y(t). \end{cases}$$
(4.73)

В системе (4.74) частота $\omega_b=2M_0/\hbar$ и функция $F_b(y)=\vartheta(-y)+\vartheta(y-L)$, отличная от нуля только в области барьеров y<0 и y>L (ϑ есть ступенчатая функция), обусловлены присутствием магнитных барьеров. Система (4.73) является системой линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами и в общем случае может быть решена лишь численно. Для случая периодического электрического поля, однако, можно получить некоторые аналитические оценки. Так, ограничившись областью КТ между барьерами при 0 < y < L, мы можем положить функция $F_b(y)=0$ во втором уравнении системы (4.73) и проинтегрировать его, в результате чего найдём явную зависимость среднего значения $k_v(t)$:

$$\bar{k}_{y}(t) = \bar{k}_{y}(0) - \frac{F}{\hbar\omega_{0}} \sin\omega_{0}t.$$
(4.74)

Начальное значение в расчётах квазиклассической динамики принято нами в виде $\bar{k}_y(0) = \pi/L$. С учётом (4.74) остальные уравнения системы (4.73) можно классифицировать как линейные уравнения с периодическими коэффициентами. Для таких уравнений, как известно, существуют области неустойчивости решений в пространстве параметров. Комбинируя уравнения системы (4.73), можно получить уравнение известного вида. Получим такое уравнение для среднего

значения проекции спина $\overline{\sigma}_x(t)$. Продифференцировав по времени обе части третьего уравнения системы (4.73), мы получим уравнения второго порядка

$$\frac{d^2 \overline{\sigma}_x}{dt^2} + 2v_F \overline{k}_y \frac{d \overline{\sigma}_y}{dt} + 2v_F \frac{d \overline{k}_y}{dt} \overline{\sigma}_y = 0.$$
(4.75)

В качестве значения производной $d\overline{\sigma}_y/dt$ мы подставим в (4.75) правую часть четвёртого уравнения системы (4.73), опустив слагаемое с функцией $F_b(y)$, поскольку мы ограничиваемся квазиклассическим рассмотрением в области между барьерами, где эта функция равна нулю. Далее, мы подставляем в (4.75) явный вид (4.74) для зависимости $\overline{k}_y(t)$. Наконец, из третьего уравнения системы (4.73) мы заменяем $\overline{\sigma}_y$ на $(d\overline{\sigma}_x/dt)/(-2v_F\overline{k})$ и также подставляем в (4.75). В результате мы получаем уравнение для одной функции $\overline{\sigma}_x(t)$:

$$\frac{d^2\overline{\sigma}_x}{dt^2} + f(t)\frac{d\overline{\sigma}_x}{dt} + g(t)\overline{\sigma}_x = 0,$$
(4.76)

где обозначено

$$f(t) = -\frac{1}{\bar{k}_{y}(t)} \frac{dk_{y}(t)}{dt}, \quad g(t) = 4v_{F}^{2}(\bar{k}_{y}(t))^{2}.$$
(4.77)

От первой производной $d\overline{\sigma}_x/dt$ в (4.76) можно избавиться, введя новую функцию $\sigma_1(t)$ по формуле

$$\overline{\sigma}_{x}(t) = \sqrt{\overline{k}_{y}(t)} \cdot \sigma_{1}(t), \qquad (4.78)$$

где $\bar{k}_y(t)$ определено в (4.74). Для осуществления такой замены мы подразумеваем, что электрическое поле *F* не настолько велико, чтобы получить отрицательные значения $\bar{k}_y(t)$, стартуя от начального положительного значения $\bar{k}_y(0)$. Для дальнейшего удобно ввести безразмерное начальное волновое число для центра пакета

$$k_0 = \frac{k_y(0)\pi\hbar\nu_F}{FL} \tag{4.79}$$

и частоту Ω , определяемую амплитудой и частотой электрического поля как

$$\Omega = \frac{2v_F F}{\hbar\omega_0}.\tag{4.80}$$

Условие $\bar{k}_{y}(t) > 0$ означает, что в (4.79) $k_0 > 1$, что ограничивает наш анализ не слишком большой амплитудой электрического поля. Наконец, после введения безразмерного времени

$$\omega_0 t = \tau \tag{4.81}$$

и подстановке всех замен (4.78)-(4.80) в (4.76) мы придём е следующему уравнению на функцию $\sigma_1(t)$:

$$\frac{d^2\sigma_1}{d\tau^2} + \Theta(\tau)\sigma_1 = 0, \qquad (4.82)$$

где

$$\Theta(\tau) = \frac{\Omega^2}{\omega_0^2} (k_0 - \sin\tau)^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{\sin\tau}{k_0 - \sin\tau} - \frac{3}{2} \frac{\cos^2\tau}{(k_0 - \sin\tau)^2} \right]$$
(4.83)

есть периодическая функция, $\Theta(\tau) = \Theta(\tau+2\pi)$. Уравнение (4.82) с периодической функцией $\Theta(\tau)$ представляет собой уравнение Хилла, которое, как известно [32], имеет неустойчивые во времени решения, отвечающие параметрическому резонансу. Анализ этого уравнения показывает, что функцию $\Theta(\tau)$ можно аппроксимировать разложением с сохранением нулевой гармоники и первой гармоники, в результате чего из уравнения (4.82) получается уравнение

$$\frac{d^2\sigma_1}{d\tau^2} + \left(\delta + \varepsilon \cos\tau\right)\sigma_1 = 0, \qquad (4.84)$$

где введены обозначения

$$\begin{cases} \delta = \left(k_0^2 + \frac{1}{2}\right)\frac{\Omega^2}{\omega_0^2} + \frac{1}{4}\left(1 - \frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 - 1}}\right), \\ \varepsilon = 2k_0\frac{\Omega^2}{\omega_0^2} + 2k_0\left(\frac{k_0}{\sqrt{k_0^2 - 1}} - 1\right) - \frac{3}{2\sqrt{k_0^2 - 1}}. \end{cases}$$
(4.85)

Уравнение (4.84) представляет собой частный случай уравнения Хилла (4.82) и называется уравнением Матьё. Оно хорошо известно в теории параметрического

резонанса [32]. Параметры задачи (k_0 , F) определяют плоскость параметров (δ , ε) из (4.85), в которой области устойчивости и неустойчивости решений образуют диаграмму, называемую диаграммой Айнса-Стретта [32], показанную на рис.4.27.



Рисунок 4.27. Диаграмма Айнса-Стретта для уравнения Матьё (4.84). Области устойчивости выделены штриховкой [32].

В пределе малого поля *F*→0 параметр δ стремится к ненулевому значению, определяемому начальным волновым числом k_0 . Для не слишком сильных полей параметр є ведёт себя как близкая к линейной функция амплитуды поля F. C ростом ε, т.е. с возрастанием параметра ε, при заданном конечном δ на диаграмме Айнса-Стретта возможен переход из области устойчивости в область неустойчивости, как это видно на рис.4.27. Для рассматриваемых типичных значений параметров с частотой и амплитудой поля $\omega_0 \sim 0.6 \cdot 10^{12}$ с⁻¹ и *F/e* ~ 1 В/см попадание в область неустойчивости вполне возможно. В следующем пункте мы рассмотрим динамику при нескольких значениях напряжённости поля. Для поля *F/e*=0.2 В/см и типичного значения $\bar{k}_v(0) = \pi/L$ параметры (4.85) следующие: δ=3.92, ε=0.2. На диаграмме Айнса-Стретта на рис.4.27 это соответствует заштрихованной области устойчивого движения. По мере роста электрического поля параметр є растёт, и мы перемещаемся на этой диаграмме вверх в области неустойчивости. Для F/e=1.0 В/см значения $\delta=4.08$ и $\epsilon=0.9$, а для поля F/e=2.0 В/см значения $\delta=4.4$ и $\epsilon=2.15$. В обоих последних случаях мы попадаем в области нестабильности на диаграмме Айнса-Стретта, что говорит о возможности неустойчивой, нерегулярной динамики в квазиклассическом пределе. Такой неустойчивый режим квазиклассической динамики является классическим аналогом нерегулярной квантовой динамики, которую мы рассмотрим в следующих пунктах.

4.6.3. Эволюция квантовой системы в методе Флоке и свойства квазиэнергетических состояний

В этом параграфе мы рассмотрим результаты расчёта квантовой эволюции начального состояния — волнового пакета, введённого в п.4.6.1, который выполняется по такой же схеме, что и расчёт в КТ с двумя дискретными уровнями в присутствии состояний континуума, описанный в предыдущем п.4.5. Начальное состояние представляет собой волновой пакет, центр которого согласно рис.4.26(б),(в) расположен приблизительно в середине спектра при n~54. Частоту поля мы будем выбирать из условия резонанса на ближайшей паре уровней, т.е.

$$\hbar\omega = E_{n+1} - E_n, \qquad (4.86)$$

как в задаче п.2.4. Поскольку электрическое поле является периодическим, мы вновь используем теорию Флоке, в рамках которой также решались задачи в главе 2. Как известно [47], [215], эволюция системы на целое число периодов $t=NT_0$ в этом случае полностью определяется расчётом оператора $U(T_0)$ эволюции на один период. Собственные значения этого унитарного оператора можно представить в виде $\exp(-iE_O^{(s)}T_0)$, s=1,2,..., где спектр вещественного параметра $E_O^{(s)}$ называется спектром квазиэнергий, а соответствующие собственные функции оператора U(T₀) называются квазиэнергетическими функциями. Со спектром квазиэнергий связан ряд представлений о характере эволюции квантовой системы [119], [47], [215]. Именно, если статистика уровней $E_0^{(s)}$ с точки зрения частоты интервала ΔE_O между ними является пуассоновской, то динамика носит регулярный характер, а переход к статистике другого типа, с максимумом расстояния между при больших уровнями квазиэнергии значениях, говорит 0 развитии нерегулярной, хаотической динамики.

На рис.4.28(а) показана статистика квазиэнергетических уровней в форме частоты повторяемости $\rho = \rho(\Delta E_Q)$ расстояния ΔE_Q между уровнями квазиэнергии для трёх значений амплитуды электрического поля: F/e=0.2 В/см (штрихпунктирная линия), F/e=1.0 В/см (сплошная линия) и F/e=2.0 В/см (пунктирная линия). Несмотря на то, что число уровней ($N\sim100$) не слишком велико, чтобы сформировать достаточно гладкое статистическое распределение, из рис.4.28(а) можно сделать вполне определённые выводы. Так, для слабого поля F/e=0.2 В/см (штрих-пунктирная линия) максимум располагается вблизи минимального $\Delta E_Q \sim$ 0.005 мэВ, а само распределение напоминает пуассоновское. Для больших полей F/e=1.0 В/см (сплошная линия) и F/e=2.0 В/см (пунктирная линия) максимум $\rho(\Delta E_Q)$ сдвигается вправо по оси ΔE_Q с ростом поля. Такое, явно не являющееся пуассоновским распределение, свидетельствует о развитии хаотического режима эволюции при возрастании электрического поля, в полном соответствии с квазиклассической картиной, описанной в предыдущем пункте.

Помимо спектра квазиэнергий, информация о характере динамики содержится в структуре квазиэнергетических собственных функций $A_n^{(s)}$, записанных как векторы в базисе стационарных состояний $\psi_n(y)$. Именно, присутствие в наборе функций, которые широко «размазаны» по пространству состояний, т.е. характеризуются большой дисперсией

$$\sigma_n^2 = \sum_n (n - \overline{n})^2 |A_n|^2, \qquad (4.86)$$

где $\bar{n} = \sum_{n} n |A_n|^2$, говорит о наличии диффузии в пространстве состояний, т.е. квантовой диффузии Арнольда, с которой мы уже сталкивались в п.2.4 при рассмотрении нерегулярной динамики в двумерном квантовом биллиарде со СОВ. Такая диффузия описывает квантовый аналог классической хаотической динамики. На рис.4.28(b) в координатах (\bar{n}, σ_n) показаны распределения квазиэнергетических состояний $A_n^{(s)}$ для тех же значений напряжённости поля, для которых приведена статистика квазиэнергий на рис.4.28(a): *F*/*e*=0.2 В/см (звёздочки), *F*/*e*=1.0 В/см (тёмные кружки) и *F*/*e*=2.0 В/см (светлые кружки).



Рисунок 4.28. (а) Статистика расстояния между квазиэнергетическими уровнями в форме частоты повторяемости $\rho = \rho(\Delta E_Q)$ расстояния ΔE_Q для трёх значений амплитуды электрического поля: F/e=0.2 В/см (штрих-пунктирная линия), F/e=1.0 В/см (сплошная линия) и F/e=2.0 В/см (пунктирная линия). В сильном поле виден переход к непуассоновской статистике со сдвигом максимума $\rho(\Delta E_Q)$ вправо. (б) Распределения квазиэнергетических состояний $A_n^{(s)}$ в координатах (\bar{n}, σ_n) с σ_n из (4.86) для тех же значений напряжённости поля, что на панели (а). С ростом напряжённости поля распределения вытягиваются вдоль вертикальной оси σ_n вплоть до $\sigma_n \sim 32$, что говорит о наличии диффузии в пространстве состояний [147].

На рис.4.28(b) можно видеть, что с ростом напряжённости поля от 0.1 до 1.0 В/см распределения вытягиваются вдоль вертикальной оси σ_n вплоть до $\sigma_n \sim 32$ при *F/e*=0.1 и 0.2 В/см что говорит о наличии диффузии в пространстве состояний. Отметим, что различия между статистикой в полях 1.0 и 2.0 В/см невелико, что говорит об определённом насыщении эффекта. Для более детального анализа эволюции нам необходимо рассмотреть поведение средних значений во времени, чем мы займёмся в следующем пункте.

4.6.4. Эволюция средних значений во времени

В этом пункте мы рассмотрим динамику средних значений различных величин в периодическом поле, прежде всего координаты $\overline{v}(t)$ и проекций спина $\overline{S}_i(t), i=x,y,z$, а также дисперсии координаты $\sigma_v^2(t) = \overline{(y-\overline{y}(t))^2}$. Кроме того, буду анализироваться их Фурье-спектры мощности $I_{\xi}(\omega) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \xi(t) \exp(-i\omega t) dt \right|^2$. Мы рассмотрим случай достаточно сильного поля *F*/*e*=1 B/см, при котором, как мы видели в предыдущих пунктах, есть проявления хаотической динамики. В качестве начального состояния мы рассмотрим широкий в пространстве волновой который описывается узким набором базисных пакет, состояний для коэффициентов $C_n(0)$. Начальное значение квазиимпульса $\bar{k}_v(0) = 0$, начальная спиновая поляризация пакета будет отвечать таковой для окружающий его магнитных барьеров при углах $\theta_1 = \theta_2 = 0$ в (4.21), т.е. $S_x(0) = 1$, $S_v(0) = 0$, $S_z(0) = 0$. Частота поля будет отвечать условию (4.86), где состояние n₀~54 отвечает середине в наборе базисных функций.

На рис.4.29 представлены основные результаты рассматриваемой эволюции, полученные после 400 периодов электрического поля с 200 точками на каждый период. Начальная точка в координатах (*y*, *S_i*) обозначена точкой А.



Рисунок 4.29. (а) Фазовый портрет средних значений (y, S_z) ; (b) то же для пары (S_x, S_y) . (c) Эволюция среднего числа уровней σ_n , участвующих в динамике, показывающая диффузию в пространстве состояний. (d) Эволюция полуширины пакета σ_y . (e) Профили плотности вероятности $\rho(y)$ и спиновой плотности $S_z(y)$ в конце эволюции. (f)-(h) Фурье-спектры мощности для *y*, S_x , S_z , отражающие присутствие нерегулярной динамики [147].

347

Начнём обсуждение рис.4.29 с панели (а), на которой представлен «фазовый портрет» динамики средних значений в паре «координата у –проекция спина S_z», поскольку оператор скорости (4.64) пропорционален σ₂. Видно, что в нём присутствует как регулярный рисунок замкнутой траектории типа фазового портрета осциллятора, так и достаточно широкое «стохастическое кольцо» вокруг этой траектории. Такая структура фазового портрета характерна для динамики с проявлениями хаоса [119], [215] и её обнаружение в системе с ТИ является, по нашему мнению, новым и интересным результатом. Как мы видели в предыдущих пунктах 4.6.2 и 4.6.3, для амплитуды поля *F*/*e*=1 В/см признаки хаотической, нестабильной динамики были обнаружены как при квазиклассическом подходе на диаграмме Айнса-Стретта, так и в структуре квазиэнергетических собственных функций на рис.4.28. Фазовый портрет на рис.4.29(а) находится в согласии с этими расчётами. Сходная картина наблюдается для портрета в паре координат «спиновая проекция S_x – спиновая проекция S_y », показанного на рис.4.29(b). Эволюция этих спиновых проекций достаточно иррегулярна во всей показанной области, хотя есть явно выраженная область сгущения средних значений вблизи начала координат.

Иллюстрацией развития диффузии Арнольда в пространстве состояний [80], [81] является зависимость среднего квадратичного уклонения для числа состояний $\sigma_n(t)$ от времени, показанная на панели (с) рис.4.29. В начале эволюции до ~80 периодов поля виден почти линейный рост $\sigma_n(t)$, что отвечает интенсивной диффузии, далее наблюдаются колебания с выходом на стационарное значение σ_n ~30, которое отвечает максимуму в распределении квазиэнергетических состояний на рис.4.28(b). Можно сделать вывод, что на начальном этапе эволюция средних значений носит черты хаотической динамики, которая, как это обычно бывает в квантовых системах [47], [215], сменяется более регулярным поведением, поскольку число задействованных состояний велико, но конечно, в отличие от истинно классической системы.

Представляет интерес эволюция формы самого волнового пакета. На панели (d) рис.4.29 показана эволюция полуширины пакета $\sigma_y(t)$, которая, хотя и

демонстрирует быстрые осцилляции, показывает, что ширина пакета соизмерима с 0.2..0.6 *L*, т.е. фактически не растёт со временем. Это является следствием близкого к эквидистантному характеру спектра осциллятора в рассматриваемой системе, для которого возможно проявление подобной стабильности волновых пакетов. На панели (е) рис.4.29 показан профиль плотности вероятности $\rho(y)$ и проекции спиновой плотности $S_z(y)$ вдоль области КТ в конце эволюции при *t*=395 T_0 . Можно видеть, что пакет, хотя и изменил свою форму, остался по ширине сравнимым с начальным распределением на рис.4.26(а).

Заключительные панели (f), (g), (h) на рис.4.29 показывают Фурье-спектры мощности для величин y, S_x , S_z . Фурье-спектр координаты характеризуется высокой густотой линий, заполняющих целые полосы, что, как мы видели в главе 2, является проявлением хаотической динамики. Для спиновых проекций густота линий меньше, однако и для проекции S_x заполнена значительная часть спектра. Что касается Фурье-спектра проекции S_z на панели (h) рис.4.29, она имеет менее богатый спектральный набор, поскольку связана со скоростью внутри KT, имеющей более регулярный, периодический характер, как это видно на фазовом портрете на панели (a).

4.6.5. Эволюция средних значений в присутствии потенциала беспорядка

Присутствие той или иной степени беспорядка является неотъемлемой частью структур даже высокого качества. Представляет интерес моделирование его влияния на динамику средних значений, рассмотренных в предыдущем разделе. Мы будем учитывать его присутствие простейшим образом: к нестационарному гамильтониану $H_0 + Fy$ соз $\omega_0 t$ мы прибавим стационарный потенциал вида

$$U_d(y) = U_0 f(y),$$
 (4.87)

где f(y) описывает функцию, принимающую в области КТ 0 < y < L значения, случайным образом распределённые в интервале [0...1]. Такой скалярный потенциал сам по себе не нарушает топологические свойства краевых состояний. Мы рассмотрим амплитуду потенциала $U_0=0.5$ мэВ, что соизмеримо с типичным

расстоянием между уровнями $E_{n+1}-E_n=0.38$ мэВ, т.е. потенциал беспорядка является умеренным с точки зрения его амплитуды. Мы сохраняем те же параметры динамики, которые использовались в предыдущем пункте для предела идеального образца. Соответствующие группировке рис.4.29 результаты в присутствии потенциала беспорядка показаны на рис.4.30.

Основные отличия результатов на рис.4.30 и рис.4.29 состоят в следующем. Прежде всего, наблюдается увеличение доли стохастической области на панелях (a) и (b) для фазового портрета средних значений (y, S_z) и (S_x , S_y), а также уменьшение со временем среднего числа участвующих в динамике состояний σ_n на панели (с). Оба этих наблюдения согласуются с интуитивно понятной ролью беспорядка, снижающего процент простых, замкнутых траекторий типа эллипса для фазовых портретов, а также усиливающего локализацию, в том числе в пространстве состояний, как это видно на панели (с) рис.4.30. Усиление локализации видно и в профилях плотности вероятности и спиновой плотности на панели (е) рис.4.30, если сравнить её с панелью (е) на рис.4.29. Характеристики Фурье-спектров на панелях (f)-(h) рис.4.30 остаются в целом такими же, как на рис.4.29, за исключением более узкой полосы частот, задействованных в динамике для S_x, как это видно на панели (g). Можно сделать вывод, что включение потенциала беспорядка модифицирует количественно некоторые характеристики динамики, усиливая локализацию в координатном пространстве и в гильбертовом пространстве состояний, но не изменяет качественно режимы динамики, по-прежнему демонстрирующие хаотические проявления.



Рисунок 4.30. То же, что на рис.4.29, в присутствии потенциала беспорядка (4.87) с амплитудой $U_0=0.5$ мэВ. Наблюдается увеличение доли стохастической области на панели (а) для фазового портрета средних значений (*y*, *S_z*) и (*S_x*, *S_y*), а также уменьшение со временем среднего числа участвующих в динамике состояний σ_n на панели (с) [147].

351

4.6.6. Выводы по п. 4.6.

В этом параграфе мы исследовали эволюцию в КТ на крае ТИ, содержащей много (N~100) дискретных уровней. Было обнаружено, что в такой системе существуют режимы хаотической динамики по крайней мере на начальном этапе эволюции. Это наблюдение подтверждается сразу несколькими независимыми инструментами: квазиклассическим подходом со сведением уравнений динамики к уравнению Матьё, анализом спектра квазиэнергетических функций, а также прямым расчётом эволюции средних значений во времени, демонстрирующим наличие областей хаотической эволюции. Такое исследование комбинаций регулярной и нерегулярной динамики для структур на базе ТИ проведено, по нашим сведениям, впервые, и может быть полезно для учёта их особенностей в задачах динамики и транспорта в нестационарных полях.

4.7. Динамика волновых пакетов на поверхности трёхмерных ТИ с магнитными барьерами

4.7.1. Постановка задачи и гамильтониан

Примеры топологических изоляторов не ограничиваются двумерными системами. Существует большой класс трёхмерных топологических изоляторов [209], [58], на крае которых, т.е. на поверхности, существуют топологически защищённые состояния с линейным законом дисперсии в низкоэнергетической области, о которых кратко говорилось в п.1.6.5. Возникает естественный вопрос, каким образом на их поведении, в том числе на динамике волновых пакетов, скажется наличие потенциальных барьеров, в том числе барьеров с намагниченностью. Прохождение через магнитные барьеры состояний с линейным, дираковским спектром, обсуждалось в п.1.6.7, где был представлен краткий обзор литературы.

В данном параграфе будет выполнено численное исследование динамики волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов семейства Bi₂Te₃ в присутствии различных потенциальных барьеров, как неполяризованных, так и поляризованных (магнитных) [45]. Мы применяем вычислительную схему Кэли [25], [36] для решения нестационарного уравнения Шрёдингера, которая позволяет аппроксимировать оператор унитарной эволюции с высокой точностью. Будет рассмотрена динамика и коэффициенты прохождения для различных поляризаций барьера и различных углов среднего волнового вектора пакета с нормалью к барьеру. Также будет обсуждаться эволюция распределений спиновой плотности на плоскости в области вблизи барьера.

В рамках аналитического подхода будет рассмотрена соответствующая статическая задача о рассеивании состояний на немагнитных и магнитных барьерах, результаты которой обобщаются на случай волновых пакетов, построенных из плоских волн. Вначале задача рассеивания решается для плоских волн, а затем полученный коэффициент прохождения используется для расчёта прохождения их интегральной комбинации, дающей волновой пакет. Будет показано, что именно двумерный характер волновых пакетов приводит к существенным отличиям в поведении коэффициента прохождения по сравнению с задачей о рассеивании плоских волн. Именно, наличие в двумерном волновом пакете плоских волн с различными проекциями волновых векторов относительно нормали к барьеру приводит к существенному подавлению эффекта клейновского туннелирования для налетающего на барьер пакета в определённом интервале энергий.

Гамильтониан задачи имеет вид

$$H = C + A(k_x \sigma_v - k_v \sigma_x) + U(x, y)\sigma_i, \qquad (4.88)$$

где первое слагаемое есть гамильтониан (1.55) поверхностных краевых состояний в Bi₂Te₃, параметр A=406.8 мэВ·нм, а константа C=-0.18 eV определяет начало отсчёта относительно спектра объёмных состояний. Функция U(x, y) определяет пространственный профиль магнитного барьера с поляризацией σ_i . Поскольку в большинстве экспериментов с ТИ на базе Bi₂Te₃ уровень Ферми был расположен в области верхней ветви закона дисперсии $E_+=\hbar v_F k$ +C, состояния этой ветви вносят определяющий вклад в формирование волнового пакета, профиль которого мы будем выбирать в гауссовой форме (1.74). Схема начального положения

волнового пакета относительно барьера-ступеньки ширины L, ориентированного параллельно оси Оу, показана в качестве примера на рис.4.31. На этом рисунке k направление среднего волнового вектора совпалает c осью Ox. перпендикулярной барьеру. Для такого пакета направление начальной спиновой поляризации $\vec{\sigma}$ ориентировано вдоль ось *Оу*. В дальнейшем мы будем рассматривать падение волнового пакета под произвольным углом $\theta = \operatorname{arctg} \overline{k}_v / \overline{k}_x$. Мы не рассматриваем здесь дополнительные члены для гамильтониана, связанные с рассеиванием на дефектах, неоднородностях, а также на фононах. Нами рассматривается задача в относительно небольшой области вблизи потенциального барьера и с небольшим по сравнению с размером барьера волновым пакетом, что ограничивает весь пространственный масштаб задачи величинами порядка 0.2...0.4 мкм.



Рисунок 4.31. Схема, показывающая исходное положение волнового пакета (1.74) с плотностью вероятности $|\psi|^2$ вблизи потенциального барьера-ступеньки в (4.88), параллельного оси *Оу* и занимающего область вдоль оси *Ох* с шириной барьера *L*=100 нм. Направление распространения пакета \vec{k} ориентировано вдоль *Ох*, начальная спиновая поляризация $\vec{\sigma}$ направлена вдоль *Оy* [45].

С учётом высокого качества материалов, обычно используемых при производстве топологических изоляторов, такие размеры не превосходят типичной длины

свободного пробега электронов, что обосновывает пренебрежение в нашей задаче эффектами релаксации импульса и спина.

4.7.2. Численный расчёт динамики волнового пакета

Наиболее простым случаем, важным с практической точки зрения, является прохождение через потенциальный барьер-ступеньку высоты U_0 , занимающий конечную область [-L/2, L/2] вдоль оси Ox и простирающийся вдоль оси Oy, как это показано на рис.4.31. При этом коэффициенты двухкомпонентного спинора в (1.74) могут быть выбраны, например, в виде $(C_1, C_2) = (1, i)/\sqrt{2}$.

Вначале мы рассмотрим случай нормального падения на барьер, т.е. при $\theta = \arctan g \bar{k}_y / \bar{k}_x = 0$, при этом начальная спиновая поляризация пакета будет направлена по оси *Oy*. Параметры барьера будут такими: амплитуда $U_0=300$ мэВ, ширина L=200 нм. В качестве первой функции, характеризующей рассеивание пакета, мы рассмотрим коэффициент прохождения T(E) как функцию средней энергии пакета E, определяемой средними значениями компонент волнового вектора (\bar{k}_x, \bar{k}_y) в начальном состоянии (1.74). Коэффициент прохождения мы определяем вначале через амплитуду спинорной волновой функции $\Psi=(\psi_1, \psi_2)$, прошедшей через барьер:

$$T(E) = \frac{\int |\Psi(x > L/2, t = t_1)|^2 dx dy}{\int |\Psi(x < -L/2, t = t_0)|^2 dx dy},$$
(4.89)

Интегрирование в (4.89) ведётся в области справа от барьера для прошедшей части пакета при $t=t_1$ и слева от барьера для налетающего пакета при $t=t_0$, где t_0 и t_1 есть моменты времени начала и окончания взаимодействия пакета с барьером, соответственно. В процессе численного решения задачи эти моменты времени определяются при непосредственном моделировании эволюции по схеме Кэли. Остановимся на определении этих моментов времени более подробно. Начиная с работы Бюттикера и Ландауэра [71] известны способы определения времени взаимодействия с барьером, применяемые для задачи о туннелировании массивной частицы. Также можно вводить время туннелирования, зная линейный

размер проходимой пакетом области взаимодействия с барьером и характерную скорость пакета, как это обсуждалось, например, в работе [52]. Для системы с безмассовым гамильтонианом, как в нашей задаче, второй способ представляется оптимальным. В самом деле, с учётом того, что для спектра (1.55) модуль групповой скорости всех состояний с различным по модулю волновым вектором одинаков и равен фермиевской скорости v_F , можно дать простую оценку для интервала взаимодействия $\Delta t = t_1 - t_0$ пакета с барьером:

$$\Delta t = \frac{L + L_{wp}}{v_E}.$$
(4.90)

В (4.90) *L* есть ширина барьера, а *L*_{wp} есть характерный размер волнового пакета, связанный с параметром полуширины $\Delta x(y)$ в (1.74) соотношением $L_{wp} = b\Delta x$, где b есть множитель, определяющий то расстояние от центра пакета, на котором уже есть заметный с вычислительной точки зрения вклад в плотность вероятности. В нашей модели мы выбирали b=5...6, что обеспечивает учёт всей области с существенно ненулевой плотностью вероятности. Учитывая, что нами рассматривались узкие по сравнению с шириной барьера L=200 нм пакеты с $\Delta x(y) = 10$ нм, мы получим, что пространственный параметр в (4.90) $L + L_{wp} = 300...320$ нм. Принимая во внимание значение фермиевской скорости $v_F =$ 6.2· 10⁷ см/с, мы получим для времени (4.90) значение порядка (4.8... 5.1)·10⁻¹³ с. Нами бралось всегда наибольшее из времён. Момент времени t₀ начала взаимодействия пакета с барьером определялся нами по достижению центром пакета расстояния $L_{wp} = b\Delta x$ до начала барьера. Момент времени t_1 может быть определён после вычисления (4.90) как $t_1 = t_0 + \Delta t$.

Мы рассматривали несколько магнитных поляризаций барьера в гамильтониане (4.88), а также неполяризованный барьер, когда матрица Паули равна σ_0 , т.е. единичной матрице. На рис.4.32(а) показана зависимость коэффициента прохождения (4.89) от средней энергии пакета для трёх типов поляризации барьера: σ_0 (немагнитный барьер), σ_x и σ_y . Видно, что для всех поляризаций барьера энергетическая зависимость коэффициента прохождения в

целом схожая. Тем не менее, различия в коэффициенте пропускания составляют от 10 до 50 процентов в области энергий Е>U₀, отвечающей надбарьерному прохождению. Такие различия является значимым фактором для потенциальных приложений в схемах со спиновым фильтром, когда прохождение зависит от поляризаций налетающего состояния и барьера. Интервал для средней энергии волнового пакета на рис.4.32(a) и для последующих расчётов взят нами в достаточно широких пределах, до 0.85 eV. Для такой максимальной энергии объёмных следует ожидать перекрытия ЗОН краевых И состояний В топологических изоляторах семейства Bi₂Te₃ [209], [58]. Мы сохранили подобный энергетический интервал в наших расчётах, с целью расширить наше моделирование на возможно большую область параметров, включая среднюю энергию пакета.

Коэффициент прохождения через барьер можно определить и иначе, следуя, например, подходу, развитому для задачи о безмассовых фермионах в графене в работе [50]. Именно, можно сопоставлять плотность потока в прошедшем и падающем на барьер состоянии, то есть анализировать среднее значение оператора скорости $v_x = A\sigma_y/\hbar$. Вместо формулы (4.89) для коэффициента прохождения мы получим схожее по структуре выражение

$$T_1(E) = \frac{\int \Psi^+(x > L/2, t = t_1) v_x \Psi^+(x > L/2, t = t_1) dx dy}{\int \Psi^+(x < -L/2, t = t_0) v_x \Psi^+(x < -L/2, t = t_0) dx dy},$$
(4.91)

Энергетическая зависимость для коэффициента прохождения в форме (4.91) показана на рис.4.32(б). Можно видеть, что она во многом схожа с графиком для коэффициента (4.89)на рис.4.32(а). Это В форме можно объяснить доминирующей у-проекцией спина в падающем на барьер волновом пакете, благодаря чему распределения плотности вероятности и у-компоненты спиновой плотности близки друг к другу. Поскольку, как это будет показано ниже, при туннелировании через магнитный барьер может происходить поворот спина, значение у-компоненты спина в прошедшем состоянии может дать меньшее значение коэффициента (4.91) по сравнению с коэффициентом (4.89). Можно

заметить подобное снижение амплитуды коэффициента прохождения на панели (б) рис.4.32 по сравнению с панелью (а), особенно существенное для низких энергий $E < U_0$.



Рисунок 4.32. (а) Зависимость коэффициента прохождения (4.89) от средней энергии волнового пакета для рассеивания на барьере с шириной L=200 нм и амплитудой $U_0=300$ мэВ, для разных типов направления намагниченности барьера (σ_0 - немагнитный барьер, σ_x , σ_y - магнитные барьеры), при нормальном падении на барьер. (б) То же для коэффициента прохождения $T_1(E)$ в форме (4.91) [45].

Анализируя результаты на рис.4.32 для обоих подходов (4.89) и (4.91) к определению коэффициента прохождения, следует отметить существенное отличие в рассеивании двумерных волновых пакетов на электростатическом барьере-ступеньке (при $\sigma_i = \sigma_0$) от рассеивания на аналогичном барьере состояний вида плоских волн [133], [265]. В последнем случае при нормальном падении

плоской волны наблюдается эффект клейновского туннелирования, при котором коэффициент прохождения равен единице независимо от энергии падающей волны и высоты барьера. Этот же эффект можно ожидать и для одномерных волновых пакетов, волновые вектора для которых располагаются вдоль прямой с ориентацией (k_x , 0). Для двумерного волнового пакета вида (1.74) данный эффект в чистом виде, т.е. со значением коэффициента прохождения T=1, не имеет места. Действительно, такой волновой пакет собран из многих плоских волн с различной ориентацией волнового вектора относительно нормали к барьеру. Клейновское туннелирование с T=1 наблюдается для нормального падения лишь для бесконечно узкого в плоскости (k_x , k_y) вклада от участка волновых векторов вида $(k_x, 0)$, что не может дать существенного вклада в коэффициент прохождения для всего волнового пакета. Этим объясняется характер зависимости T(E) на рис.4.32, которая не достигает единицы даже для немагнитного, т.е. электростатического барьера. Подобная особенность свойственна именно прохождению двумерных волновых пакетов, И может иметь важное значение при дальнейших исследованиях и приложениях их транспортных свойств.

Кроме энергетической зависимости коэффициента прохождения представляет интерес также его угловая зависимость, построенная при какой-либо фиксированной средней энергии пакета. На рис.4.33(а) приведён пример такой зависимости для барьера ширины L=200 нм и амплитудой $U_0=300$ мэВ, при падении на него волнового пакета со средней энергией E=600 мэВ, рассчитанной по формуле (4.89). На рис.4.33(б),(в) приведены примеры угловой зависимости с использованием выражения (4.91), причём на рис.4.33(в) средняя энергия пакета равна значению 1 eV, большему по сравнению с графиками на рис.4.33(а),(б). Для всех случаев видно, что по мере роста угла падения, отсчитываемого в радианах от нормали к барьеру, коэффициент прохождения убывает.



Рисунок 4.33. (а) Угловая зависимость $T(\theta)$ коэффициента прохождения (4.89) для барьера с шириной L=200 нм и амплитудой $U_0=300$ мэВ, при падении на него волнового пакета со средней энергией E=600 мэВ, показанная для различных поляризаций барьера. (б) То же для угловой зависимости коэффициента $T_1(\theta)$ из (4.91). (в) То же для коэффициента прохождения в форме (4.91) при средней энергии пакета E=1 эВ [45].

Для энергии E=600 мэВ он становится весьма малым уже при углах около $\theta=\pi/4$ (рис.4.33(а),(б)), а для энергии E=1 эВ область малых значений сдвигается вправо
(рис.4.43(в)). Обращает на себя внимание тот факт, что полученная угловая зависимость качественно схожа для барьеров с любой поляризацией, в том числе для немагнитного, т.е. электростатического барьера (кривая с индексом σ_0 на рис.4.33). Такое быстрое спадание коэффициента прохождения в отличие от рассеивания на барьере состояний вида плоских волн [133], [265] также обусловлено двумерным характером волнового пакета в нашей задаче, для которого отдельные составляющие его плоские волны входят с разными проекциями волнового вектора. При заданном значении угла встречи θ с нормалью для среднего волнового вектора пакета эти составляющие могут быть ориентированы к нормали для барьера под значительно большими углами, чем θ . Это объясняет более быстрое спадание коэффициента прохождения для двумерного пакета. Такие особенности угловой зависимости коэффициента прохождения также позволяют говорить о более эффективном механизме конфайнмента двумерных волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов по сравнению с одномерными пакетами или состояниями вида плоских волн.

4.7.3. Аналитические результаты для коэффициента прохождения в статическом случае

В данном пункте будет рассмотрен другой подход к задаче рассеивания волнового пакета на потенциальном барьере [45]. Вначале мы получим выражение для коэффициента прохождения для состояния вида плоской волны с двухкомпонентным спинорным множителем, а затем построим из таких состояний волновой пакет, и проинтегрируем коэффициент прохождения с соответствующим распределением для волнового пакета в k-пространстве. Схожая задача рассматривалась для рассеивания состояний типа плоских волн на квантовой яме в графене [191], [133], при этом потенциал ямы был немагнитный. Мы полагаем, что решение подобной задачи для волнового пакета, взаимодействующего с магнитным барьером, будучи интересным само по себе, служит также полезным дополнением к моделированию динамической задачи о

рассеивании пакета, описанной выше. Возможность получения аналитического выражения для коэффициента прохождения позволит дать более обоснованную оценку значимости численных результатов из предыдущего раздела нашей работы.

Мы решаем стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (4.88) для двухкомпонентной спинорной функции (ψ_1 , ψ_2). Для барьера, зависящего только от x, компонента k_y квазиимпульса является хорошим квантовым числом, поэтому компоненты волновой функции можно искать в виде

$$\psi_{1,2} = \exp(ik_y y) \varphi_{1,2}(x).$$
 (4.92)

После подстановки функции (4.92) в уравнение Шрёдингера мы получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $\varphi_{1,2}(x)$, зависящую от поляризации барьера. Мы опишем подробно решение для немагнитного барьера, когда в (4.88) $\sigma_i = \sigma_0$. Для магнитного барьера решение строится аналогично. В области немагнитного барьера -L/2 < x < L/2 система уравнений для функций $\varphi_{1,2}(x)$ имеет следующий вид:

$$\begin{cases} (C+U_0)\varphi_1 + A(\varphi_2 k_y + d\varphi_2 / dx) = \varepsilon \varphi_1, \\ (C+U_0)\varphi_1 + A(\varphi_2 k_y - d\varphi_2 / dx) = \varepsilon \varphi_1. \end{cases}$$
(4.93)

Комбинируя эти уравнения, можно получить связь

$$\varphi_2 = \frac{A(\varphi_1 k_y - d\varphi_1 / dy)}{\varepsilon - C - U_0}, \qquad (4.95)$$

а для компоненты $\varphi_1(x)$ мы получим уравнение $d^2 \varphi_1 / dx^2 + a^2 \varphi_1 = 0$, где параметр

$$a^{2} = (\varepsilon - C - U_{0})^{2} / A^{2} - k_{y}^{2}.$$
(4.96)

Решение мы ищем в виде комбинации плоских волн, учитывая то, что на барьер слева налетает волна с единичной амплитудой, а справа от барьера есть лишь прошедшая волна. Это позволяет записать решение во всей области пространства в виде

$$\varphi_{1}(x) = \begin{cases} e^{ibx} + \alpha e^{-ibx}, & x < -L/2, \\ \beta_{1}e^{iax} + \beta_{2}e^{-iax}, & -L/2 < x < L/2, \\ \delta e^{ibx}, & x > L/2, \end{cases}$$
(4.97)

где аналогично (4.96) для области вне барьеров введён параметр

$$b^{2} = (\varepsilon - C)^{2} / A^{2} - k_{y}^{2}.$$
(4.98)

Коэффициенты α , β_1 , β_2 , δ волновой функции (4.97) находятся при заданной энергии ε из условий непрерывности компонент спиноров (φ_1 , φ_2) на двух границах барьера при $x = \pm L/2$. Определим коэффициент прохождения аналогично (4.89):

$$T(\varepsilon, k_{y}) = \frac{|\Psi(x > L/2)|^{2}}{|\Psi_{in}(x < -L/2)|^{2}},$$
(4.99)

где ψ_{in} есть набегающая слева на барьера волна с $\varphi_1 = e^{ibx}$, поэтому $|\psi_{in}| = 1$, и аналогично для уходящей волны $|\psi(x > L/2)| = |\delta|$, поэтому коэффициент прохождения

$$T_0(\varepsilon, k_y) = |\delta|^2. \tag{4.100}$$

Коэффициент (4.100) может быть вычислен в явном виде. Для немагнитных барьеров он записывается как

$$T_0(\varepsilon, k_y) = \frac{1}{\left|\cos(aL) - i\left(\sqrt{(a^2 + k_y^2)(b^2 + k_y^2)} - k_y^2\right)\sin(aL)/(ab)\right|^2}.$$
 (4.101)

Для магнитных барьеров можно получить аналогичное выражение:

$$T_0(\varepsilon, k_y) = \left| \frac{4a_i b}{(a_i + b)^2 - (a_i - b)^2 \exp(2ia_i L)} \right|^2,$$
(4.102)

где для барьеров с поляризацией i=x,z выражение для b совпадает с (4.98), а параметр a_i для барьера с х-поляризацией есть

$$a_x^2 = \frac{(\varepsilon - C)^2 - (U_0 + Ak_y)^2}{A^2},$$
(4.103)

а для барьера с *z*-поляризацией он равен

$$a_z^2 = \frac{(\varepsilon - C)^2 - U_0^2 - A^2 k_y^2}{A^2}.$$
 (4.104)

По аналогии с выводом выражения (4.91) для динамической задачи можно записать и выражение для коэффициента прохождения в статической задаче,

основываясь на его определении через отношение потоков, т.е. через среднее значение оператора скорости *v_x* в прошедшей и налетающей волне:

$$T_{2}(\varepsilon, k_{y}) = \frac{\int \Psi^{+}(x > L/2) v_{x} \Psi(x > L/2) dx dy}{\int \Psi^{+}(x < -L/2) v_{x} \Psi(x < -L/2) dx dy},$$
(4.105)

для которого, как это несложно проверить, вновь справедливо равенство (4.100), которое мы и будем применять для последующих расчётов.

Нас интересует приложение формул (4.101) или (4.102) не для одиночной плоской волны и её комбинаций вида (4.97), а для волнового пакета в форме (1.74). Для него можно получить разложение по плоским волнам (Фурье-преобразование), которое мы обозначим как $\psi(E, k_x, k_y)$, где E обозначает среднюю энергию волнового пакета, фактически определяющуюся значениями (\bar{k}_x, \bar{k}_y) в (1.74). Различные значения (k_x, k_y) отвечают различным энергиям для спектра (1.55) и коэффициентам (4.101) или (4.102). Интегрируя по (k_x, k_y) , мы запишем коэффициент прохождения $T_s(E)$ как функцию средней энергии для статической задачи как

$$T_s(E,\theta) = \int |\Psi(E,k_x,k_y)|^2 T_0(\varepsilon,k_y) dk_x(\varepsilon) dk_y.$$
(4.106)

Отметим, что аналогичное (4.106) выражение было использовано в работе ([205]) при анализе динамики гауссовских пакетов, подчиняющихся уравнению Дирака. В формулу (4.106) следует подставить выражение для Фурье-образа волнового пакета (1.74), получаемое элементарным интегрированием, и формулу (4.101) или (4.102) для коэффициента прохождения плоской волны. Получаемый для $T_s(E,\theta)$ интеграл уже не вычисляется в элементарных функциях, и для получения приводимых ниже графиков используются численные методы интегрирования. Отметим, что в (4.106) интегрирование по k_x проводится с учётом того, что k_x определяется через k_y и ε согласно выражению $\varepsilon = \pm A \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ для спектра энергии. Для неё мы учитываем обе ветви спектра, причём для верхней ветви берутся состояния с $k_x>0$, а для нижней ветви - состояния с k_x конуса, в то время как нас интересуют лишь состояния, налетающие на барьер слева, т.е. имеющие проекцию $v_x > 0$.

Выражение (4.106) может быть исследовано при различных параметрах системы, в первую очередь от средней энергии пакета при различной поляризации барьера, а также при различных углах встречи θ волнового пакета с барьером. Как и для динамической задачи, мы начнём с простейшего случая нормального падения пакета на барьер с теми же параметрами: амплитудой U₀=300 мэВ и шириной L=200 нм. На рис.4.34 показана зависимость $T_s(E)$ в той же области средней энергии пакета и для рассеивания на барьере с теми же параметрами, что и на рис.4.32, для нормального угла падения $\theta=0$. Можно видеть, что по амплитуде в динамической задаче коэффициент прохождения примерно в полтора раза ниже. На рис.4.34 также видны особенности коэффициента для немагнитного барьера с $\sigma_i = \sigma_0$ при низких энергиях *E*<0.3 эВ, т.е. при *E*<*U*₀, отсутствующие в динамической задаче. Здесь для малых энергий коэффициент прохождения существенно выше, чем для магнитных барьеров с $\sigma_i = \sigma_{x,z}$, для которых $T_s(E) \le 1$. Это можно объяснить частичным проявлением клейновского туннелирования для электростатического барьера, хотя и не в пределе $T_s(E) \rightarrow 1$, который имеет место лишь для рассеивания состояний типа плоской волны в стационарной задаче.

Для магнитных барьеров, как известно, клейновского туннелирования с $T_s(E)$ =1может не быть при любых энергиях рассеивающегося состояния [265], [266], [268], что подтверждается результатами на рис.4.34 для $\sigma_i = \sigma_{x,z}$. В области промежуточных энергий 0.30 < E < 0.45 eV для немагнитного барьера и в области 0.25 < E < 0.45 eV для магнитных барьеров поведение коэффициента прохождения на рис.4.32 и рис.4.34 в динамической и статической задачах качественно схожее, в смысле возрастания при увеличении энергии и слабой зависимости $T_s(E)$ от поляризации барьера.



Рисунок 4.34. (а) Зависимость от средней энергии волнового пакета для коэффициента прохождения (4.106) в статической задаче о рассеивании пакета на барьере-ступеньке с L=200 нм и $U_0=300$ мэВ, для нормального падения на барьер с $\theta=0$. Виден локальный максимум для случая немагнитного барьера при энергии $E\sim U_0/2$, происхождение которого объясняется резонансным прохождением плоских волн при выполнении условия (4.107) [45].

Обсудим подробнее особенности коэффициента прохождения на рис.4.34 при $E < U_0$, наблюдаемые для немагнитного барьера. Из графика видно, что коэффициент имеет локальный максимум при средней энергии пакета, равной приблизительно половине высоты барьера. Покажем, как это можно пояснить, исходя из выражения (4.101). Как известно из работы [133], полное прохождение плоской волны в системе с дираковским спектром возможно не только при нормальном падении на барьер, но и при некоторых других углах и/или энергиях волны, удовлетворяющих резонансному условию, при котором выражение (4.101) даёт значение $T_0=1$:

$$aL = \pi N, \quad N=0,1,2,\dots$$
 (4.107)

Подставляя в (4.107) выражение для *а* из (4.96) и учитывая, что $k_y = k \sin \theta$, а амплитуда волнового вектора определяется из спектра E = C + Ak, мы можем переписать условие (4.107) в виде $L\sqrt{(E - U_0)^2 - E^2 \sin^2 \theta} = \pi NA$. Перейдя к безразмерным переменным $\gamma = \pi NA/LE$, $\xi = E/U_0$, мы запишем его в виде

$$\sqrt{\left(1-\frac{1}{\xi}\right)^2-\sin^2\theta}=\gamma.$$
(4.108)

Для волнового пакета, составленного из многих плоских волн, равенство (4.108) может выполняться для различных углов θ и различных энергий (т.е. различных ξ и γ) для отдельной плоской волны, входящей в пакет. Чтобы учесть интегральный характер получаемого при этом эффекта, произведём в (4.108) усреднение по углам θ падения плоских волн на барьер, учитывая, что среднее значение $\sin^2 \theta$ на интервале [0, π] равно 1/2. После возведения (4.108) в квадрат и усреднения мы получим равенство

$$\left(1 - \frac{1}{\xi}\right)^2 - \frac{1}{2} = \gamma^2.$$
(4.109)

Из (4.109) непосредственно следует выражение для параметра ξ, определяющего отношение энергии плоской волны к амплитуде барьера при условии подбарьерного прохождения, когда ξ<1:

$$\xi = \frac{1}{1 + \sqrt{1/2 + \gamma^2}}.$$
(4.110)

Для параметров нашей задачи с L=200 нм, A=406.8 мэВ·нм и типичной энергии плоских волн в интервале 100... 500 мэВ мы видим, что значение параметра γ^2 в (4.110) много меньше единицы для всех первых резонансов (4.107) с N≈0,...,5 и для первоначальной оценки им можно пренебречь. В этом случае формула (4.110) даёт нам значение ξ≈ 0.585. Это означает, что при значении средней энергии набора плоских волн, составляющих пакет, в области половины высоты барьера U₀/2, коэффициент прохождения должен иметь локальный максимум, который и наблюдается на рис.4.34 вблизи *E*/U₀≈0.6. Отметим, что значение самого коэффициента T_s (*E*) на рис.4.34 для немагнитного барьера при энергии $E/U_0 \approx 0.6$, равное ≈0.95, находится в удовлетворительном согласии с результатом на рис.1 работы ([205]), где для наиболее узкого барьера оно равно ≈0.75. Что касается магнитных барьеров, то для них выполнить условие $T_0=1$ для волнового пакета в случае подбарьерного прохождения с энергией *E*<*U*₀ не представляется возможным, как это можно проверить непосредственной подстановкой в (4.107) выражений (4.103) или (4.104) для магнитных барьеров.

Наряду с энергетической зависимостью представляет интерес и угловая зависимость коэффициента прохождения для статической задачи, аналогичная представленной на рис.3. На рис.4.35 показана угловая зависимость $T_s(\theta)$, рассчитанная по (4.106) для волнового пакета со средней энергией 600 мэВ, налетающего на такой же барьер, для которого представлены результаты на рис.4.34 для статической задачи и на рис.4.32 и рис.4.33(а),(б) для динамической задачи.



Рисунок 4.35. Угловая зависимость $T_s(\theta)$, рассчитанная по (4.106) для волнового пакета со средней энергией Е=600 мэВ, налетающего на барьер с L=200 нм и $U_0=300$ мэВ. Наблюдается эффективное прохождение при малых углах встречи с нормалью к барьеру, независимо от поляризации барьера. При увеличении угла встречи с нормалью для всех поляризаций коэффициент прохождения спадает, но для σ_z - поляризации барьера уменьшение $T_s(\theta)$ начинается при больших углах падения [45].

На рис.4.35 можно видеть, что для рассматриваемого случая средней энергии пакета, превышающей высоту барьера, наблюдается эффективное прохождение при малых углах встречи с нормалью к барьеру, независимо от поляризации барьера. При увеличении угла встречи с нормалью для всех поляризаций коэффициент прохождения спадает. Схожая зависимость со спаданием коэффициента прохождения при увеличении угла падения пакета наблюдалась в работе [205]. Для σ_z - поляризации барьера уменьшение $T_s(\theta)$, начинается при больших углах падения. Такое поведение по крайней мере в области

промежуточных углов $0.05\pi < \theta < 0.2\pi$ для поляризаций барьера σ_x и σ_z качественно согласуется с представленными на рис.4.33 результатами для динамической задачи, при этом на рис.4.33 максимальная амплитуда $T_s(\theta)$ ниже. Как и для энергетической зависимости на рис.4.32 и рис.4.34, мы полагаем, что это различие связано с более интенсивным отражением в динамической задаче гармоник с большим волновым вектором, составляющих волновой пакет, из-за чего в динамической задаче максимальная величина коэффициента прохождения уменьшается. Отметим, что для σ_z - поляризации барьера коэффициент $T_s(\theta)$ сохраняет большую амплитуду на больших углах встречи с барьером, чем для других случаев. Это можно объяснить эффективным поворотом локальной спиновой плотности при поляризации барьера вдоль направления Oz.перпендикулярного плоскости, образованной средним волновым вектором пакета (вдоль Ox) и исходным вектором среднего спина (вдоль Oy). При повороте спина вклад гармоник в прошедшую часть пакета, имеющих ту же поляризацию, что сам барьер, увеличивается, что увеличивает и коэффициент прохождения. Для двух других случаев с неполяризованным барьером с барьером, поляризованным вдоль Ox, эффективного поворота спиновой плотности не происходит.

4.7.4. Выводы по п. 4.7

Общим наблюдением по итогам исследования динамической и статической задач о прохождении волнового пакета, собранного из краевых состояний ТИ Bi₂Te₃, через немагнитные и магнитные барьеры, является то, что даже для нормальной ориентации среднего волнового вектора двумерного волнового пакета при его взаимодействии с барьером эффект клейновского туннелирования, т.е. полное прохождение для любой энергии падающего состояния, в чистом виде не имеет места. Это, как уже было отмечено выше, обусловлено именно двумерным характером рассматриваемых волновых пакетов, в которые входят плоские волны с различной ориентацией волнового вектора относительно барьера, а не только с нормальной, как для одномерных волновых пакетов. Указанный эффект достигается как с помощью магнитных, так и немагнитных,

т.е. электростатических барьеров. В немагнитном случае подобного уменьшения туннелирования при нормальном падении одномерных пакетов или плоских волн добиться нельзя как раз из-за клейновского туннелирования. Обнаруженное появление конфайнмента для двумерных пакетов даёт основы для создания механизмов воздействия на их прохождение с помощью магнитных и немагнитных барьеров, что может быть полезно при создании новых устройств на основе трёхмерных топологических изоляторов с хорошими транспортными свойствами краевых состояний.

4.8. Особенности динамики волновых пакетов и магнитопоглощения при учёте гексагонального искажения спектра поверхностных краевых состояний в Bi₂Te₃

4.8.1. Гамильтониан и спектр уровней Ландау

В п.1.6.5. главы 1 мы кратко остановились на описании поверхностных состояний для трёхмерных ТИ семейства Bi₂Te₃. Гамильтониан этих состояний в форме (1.54) содержит как линейное по квазиимпульсу слагаемое, так и члены, квадратичные и кубические по компонентам квазиимпульса. В этом параграфе мы остановимся на влиянии кубических слагаемых, вызывающих гексагональные по типу симметрии в k-пространстве искажения в спектре (1.56), показанные на будут интересовать эффекты кубических рис.1.38. Hac OT слагаемых, проявляющиеся в структуре уровней Ландау в магнитном поле, в динамике волновых пакетов и в особенностях коэффициента магнитопоглощения [38]. Как уже было отмечено в п.1.6.5., квадратичное слагаемое в гамильтониане (1.54) является малой поправкой для интересующей нас низкоэнергетической области и имеет такую же симметрию при формировании спектра, что и основное линейное слагаемое. Поэтому в дальнейшем мы не будем включать квадратичное слагаемое в расчёты. Что касается кубического слагаемого в гамильтониане (1.54), оно даёт принципиально другую, гексагональную симметрию в спектре, как это видно на рис.1.38, поэтому его эффекты с точки зрения симметрии имеют качественный характер.

При наличии магнитного поля, ориентированного перпендикулярно плоскости краевых состояний Bi₂Te₃, вдоль нормали ко которой мы направим ось *Oz*, гамильтониан при учёте только линейного слагаемого имеет вид (1.57), где введены операторы рождения и уничтожения. Его спектр даётся формулой (1.58), а волновые функции, являющиеся двухкомпонентными спинорами, определены в (1.59). Нашей задачей будет далее учёт кубических слагаемых из (1.54). Сохраняя все обозначения п.1.6.5. и вводя ещё параметр $\gamma = \sqrt{2\hbar\lambda}/\ell_H^3$, где λ есть амплитуда кубического слагаемого в (1.54), а ℓ_H есть магнитная длина, мы получаем в качестве обобщения гамильтониана (1.57), что

$$H = H_0 + V = \begin{vmatrix} \Delta & -i\varepsilon_0 a^+ \\ i\varepsilon_0 a & -\Delta \end{vmatrix} + \gamma \begin{vmatrix} (a^+)^3 + a^3 & 0 \\ 0 & -(a^+)^3 - a^3 \end{vmatrix},$$
(4.111)

т.е. кубическое слагаемое рассматривается как возмущение *V*. Условие применимости теории возмущений, т.е. малости второго слагаемого в (4.111) по сравнению с первым, можно записать в виде [216]

$$\frac{\lambda}{\ell_H^3} \ll \frac{\nu}{\ell_H},\tag{4.112}$$

где $v=3.8\cdot10^7$ см/с есть характерная скорость электронов для краевого состояния в Bi₂Te₃, а амплитуда кубического слагаемого $\lambda=3.7\cdot10^{-7}$ см³/с. Отметим, что значения постоянной λ является оценочным и требует уточнения с помощью экспериментальных исследований, в которые, как мы считаем, можно включить рассматриваемые ниже особенности оптического поглощения, обусловленные кубическим слагаемым в (4.111). Подставляя параметры v и λ в (4.112), мы получаем, что левая часть составляет порядка 0.01 от правой части, что оправдывает применение теории возмущений. Непосредственным вычислением проверяется, что отличны от нуля только матричные элементы $V_{n\pm3,n}$ между состояниями (1.59). В рамках теории возмущений могут быть найдены поправки к энергии уровней Ландау (1.58), которые отличны от нуля во втором порядке по γ [38]:

$$E_n^{(2)} = \frac{|V_{n-3,n}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}} + \frac{|V_{n+3,n}|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}}.$$
(4.113)

Спектр определяется суммой $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(2)}$, где $E_n^{(0)}$ задано в (1.58), а поправка $E_n^{(2)}$ дана в (4.113). Поправки к волновым функциям первого и второго порядков равны

$$\begin{cases} \Psi_{n}^{(1)} = \frac{V_{n-3,n}}{E_{n}^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}} \Psi_{n-3}^{(0)} + \frac{V_{n+3,n}}{E_{n}^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}} \Psi_{n+3}^{(0)}, \\ \Psi_{n}^{(2)} = \frac{V_{n-6,n-3} V_{n-3,n}}{\left(E_{n}^{(0)} - E_{n-6}^{(0)}\right) \left(E_{n}^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}\right)} \Psi_{n+6}^{(0)} - \\ - \left(\frac{|V_{n-3,n}|^{2}}{\left(E_{n}^{(0)} - E_{n-3}^{(0)}\right)^{2}} + \frac{|V_{n+3,n}|^{2}}{\left(E_{n}^{(0)} - E_{n+3}^{(0)}\right)^{2}}\right) \frac{\Psi_{n}^{(0)}}{2}. \end{cases}$$
(4.114)

На зависимости уровней Ландау $E_n = E_n(B)$ от магнитного поля, показанной на рис.4.36, невозмущённые уровни Ландау отмечены тонкими линиями, а уровни с учётом поправки (4.113) изображены жирными линиями. Можно сделать вывод, что учёт кубического слагаемого в (4.111) не вносит существенного искажения в спектр для рассматриваемой области энергии и магнитного поля, поэтому следует рассмотреть влияние кубического слагаемого на более тонкие эффекты, в частности, проявляющиеся в циклотронной динамике волновых пакетов в присутствии магнитного поля.



Рисунок 4.36. Уровни Ландау для гамильтониана (4.111) с учётом гексагонального искажения, вызванного кубическим слагаемым (жирная линия) и без его учёта (тонкая линия) [38].

4.8.2. Циклотронная динамика волновых пакетов

Для исследования особенностей свободной динамики электронных состояний в системе с гамильтонианом (4.111) в постоянном магнитном поле рассмотрим эволюцию во времени волнового пакета, составленного из состояний Ψ_n , в которых учтены поправки первого и второго порядка от кубического слагаемого, определённые в (4.114). Энергии $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(2)}$ близки к энергии некоторого выбранного состояния с квантовым числом n_0 . Кроме того, задана дисперсия δn в пространстве состояний. Полученный волновой пакет, имеющий средний импульс $p_0=\hbar k_0$, ориентированный вдоль оси Ox, может быть записан в виде

$$\Psi(x, y, t) = \int dp \sum_{n} S_{n}(p) \Psi_{n} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E_{n}t - px)\right), \qquad (4.115)$$

где профиль огибающей

$$S_{n}(p) = \sqrt{\frac{\ell_{H}}{\pi \,\delta n}} \exp\left(-\frac{\ell_{H}^{2} (p - \hbar k_{0})^{2}}{2\hbar^{2}} - \frac{(n - n_{0})^{2}}{2(\delta n)^{2}}\right)$$
(4.116)

выбран аналогично использовавшемуся в работе (Romera 2009) для дираковских состояний в графене. В наших расчётах мы используем значение $k_0=10^7$ см⁻¹, магнитное поле $B=10^5$ Gs, положение центра пакета $n_0=40$ и дисперсия $\delta n=2$.

Рассмотрим эволюцию волнового пакета (4.115) в течение циклотронного периода $T_{cl}=2\pi/\omega_c$. Распределение электронной плотности волнового пакета, полученная аналитически из выражения (4.115), в некоторые моменты времени внутри одного циклотронного периода, показана на рис.4.37. На панели (а) показано начальное, соответствующее моменту времени t=0, на панели (b) показано распределение в момент времени $t=T_{cl}/6$, на панели (c) показано распределение в момент времени $t=T_{cl}/6$, на панели (c) показано распределение в момент времени $t=T_{cl}/6$, на панели (d) показано периода $t=T_{cl}$. Классический циклотронный период для выбранных параметров равен $T_{cl}=1.2\cdot10^{-12}$ с, магнитная длина $\ell_H = 7.8$ нм. Плотность вероятности $|\Psi|^2$ отложена в относительных единицах.



Рисунок 4.37. Вид волнового пакета (4.115) в координатном пространстве в различные моменты времени в течении циклотронного периода $T_{cl}=2\pi/\omega_{cl}$, где частота ω_{cl} отвечает состоянию n_0 центра пакета. (а) Начальное состояние, соответствующее моменту времени t=0, (b) в момент времени $t=T_{cl}/6$; (c) в момент времени $t=T_{cl}/4$; и (d) в момент времени $t=T_{cl}$. Классический циклотронный период равен $T_{cl}=1.2\cdot10^{-12}$ с, магнитная длина $\ell_H = 7.8$ нм. Плотность вероятности $|\Psi|^2$ отложена в относительных единицах [38].

В начальный момент времени волновой пакет локализован на циклотронной орбите, и с течением времени происходит вращение волнового пакета вдоль орбиты с некоторой частотой ω_{cl} , отвечающей уровню n_0 центра пакета. Во время вращения максимальная амплитуда волнового пакета осциллирует с частотой $6\omega_{cl}$, а сама орбита представляет из себя замкнутую гексагонально деформированную линию. Наличие этих особенностей траектории является прямым следствием гексагонального искажения в электронном спектре и структуры поправок (4.114) к волновой функции.

Проведя усреднение по пространству координат волновой функции, можно построить траекторию движения центра рассматриваемого волнового пакета и получить временную зависимость его скорости на интервале времени, равном циклотронному периоду T_{cl} . Применив преобразование Фурье к компоненте

374

средней скорости, например к \bar{v}_x , можно обнаружить в спектре гармоники циклотронной частоты. Результаты этих расчетов приведены на рис.4.38. Как видно на панели (a), траектория движения центра пакета представляет из себя замкнутую кривую, деформированную благодаря гексагональному искажению спектра. Скорость движения пакета возрастает на спрямлённых участках траектории и снижается на изгибах, осциллируя при этом шесть раз за циклотронный период, как это видно на панели (b). Фурье-анализ скорости на панели (c)показывает наличие спектре помимо основной частоты В циклотронного движения ω_{cl} также некоторого набора её гармоник.



Рисунок 4.38. Траектория (а) и скорость (b) центра волнового пакета, определенные в течении циклотронного периода T_{cl} . (c) Фурье-спектр *х*-проекции средней скорости. Циклотронная частота $\omega_c = 5.4 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$. (d), (e) Зависимость от времени *х*-компоненты средней скорости на больших временах в модели (4.11) (d) с учётом гексагонального искажения и (e) в изотропной модели при $\lambda = 0$ [38].

Этот набор представляется частотами $(6 \pm 1)\omega_{cl}$ и $(3 \pm 1)\omega_{cl}$ в соответствии со строением волновой функции (4.114). Его наличие также отражает качественное влияние гексагонального искажения спектра на динамику электронных состояний.

Следует отметить, что гексагональное искажение электронного спектра оказывает существенное влияние на динамику электронных волновых пакетов и на больших временах $t >> T_{cl}$, что можно отметить на панели (d) рис.4.38. Для сравнения на панели (e) приведена зависимость компоненты скорости \bar{v}_x в единицах модуля скорости v от времени в течении 70 циклотронных периодов для изотропного случая при $\lambda=0$. Можно видеть, что гексагональное искажение вносит существенный вклад во временной профиль зависимости скорости центра пакета от времени, что может найти отражение в транспортных свойствах исследуемого материала.

Мы надеемся, что обнаруженные особенности траектории пакета и его осцилляции могут проявляться в экспериментах по транспорту в структурах на базе топологических изоляторов, что поможет дать ответ на вопрос о существенности гексагональных искажений спектров в рассматриваемых материалах.

4.8.3. Влияние гексагонального искажения на коэффициент поглощения

Эффекты гексагонального искажения спектра могут качественным образом проявиться в частотной зависимости коэффициента оптического поглощения. В случае изотропного спектра вида $E=\hbar vk$ при $\lambda=0$ для двумерной системы с гамильтонианом (1.55) в квантующем магнитном поле под действием электромагнитного излучения разрешён только один переход с $\Delta n = \pm 1$. Учёт в гамильтониане (1.54) и (4.111) кубического слагаемого, пропорционального λ , приводит к изменению спектра и симметрии волновых функций. Вследствие этого некоторые переходы, запрещённые в изотропном случае, будут теперь разрешены. Исследование зависимости коэффициента поглощения от частоты внешнего электромагнитного поля позволят прояснить, какие именно переходы возможны в присутствии гексагональных искажений спектра.

Пусть постоянное магнитное поле по-прежнему ориентировано перпендикулярно поверхности топологического изолятора, $\vec{B} \parallel Oz$. На

поверхность падает циркулярно поляризованная электромагнитная волна, распространяющаяся вдоль магнитного поля. При этом вращающийся вектор напряжённости электрического поля лежит в плоскости (*x*,*y*). Используя замену $k_i \to k_i + (e/\hbar c)A_i$, через векторный потенциал введём в гамильтониан (1.54) помимо постоянного магнитного поля, как это было сделано выше, и $\vec{E} = (\vec{e}_{r} \pm i\vec{e}_{v})E_{0}\exp(i\omega t)$ электрическое поле волны праводля И левополяризованной волны, соответственно. Мы оставим только линейные по напряжённости электрического поля E₀ слагаемые, что эквивалентно учёту в возмущении только линейной части гамильтониана (1.54). Получившийся гамильтониан запишем в виде суммы *H*+*V*, где роль невозмущённого играет гамильтониан (4.111), содержащий только гамильтониана теперь постоянное магнитное поле, а оператор V содержит только электрическое поле волны. Новый оператор возмущения V запишем в виде

$$V_{\pm} = \frac{v e E_0}{\omega} \left(\sigma_y \mp i \, \sigma_x \right) e^{i \omega t} \tag{4.117}$$

для правой и левой поляризации соответственно. Матричные элементы оператора (4.117) вычисляются по волновым функциям Ψ_n гамильтониана (4.111), найденным по теории возмущений и учитывающим в своей структуре наличие гексагонального искажения.

Вероятности переходов из состояния *n* в состояние *n'* под действием переменного электрического поля могут быть вычислены непосредственно. Для правополяризованной волны отличны от нуля матричные элементы $V_{n+2, n}$ и $V_{n+5, n}$, а для левополяризованной волны – $V_{n+1, n}$, $V_{n+4, n}$ и $V_{n+7, n}$. Коэффициент поглощения электромагнитного излучения (поглощаемая в единице объёма мощность), в зависимости от частоты электромагнитного поля и напряженности постоянного магнитного поля, с учётом (4.117) определяется выражением [2]

$$\alpha(\omega) = \frac{16\pi^2 e^2 v^2}{c\sqrt{\widetilde{\varepsilon}}\omega} \sum_{i,j} |\sigma_{\pm}|_{ij}^2 \,\delta(E_j - E_i - \hbar\omega) (f(E_i) - f(E_j)), \qquad (4.118)$$

где $\sigma_{\pm} = \sigma_y \mp i \sigma_x$ отвечает право- или левополяризованной электромагнитной волне, $\tilde{\varepsilon}$ есть диэлектрическая проницаемость, f(E) есть распределение Ферми. График функции (4.118) показан на рис.4.39 при энергии Ферми E_F=0.28 эВ и температуре Т=77 К. При таком выборе значений параметров резонансные переходы происходят вблизи уровня Ландау с номером n₀=40. Помимо температуры, нами также учтено естественное уширение уровней из-за возможных неоднородностей структуры при моделировании дельта-функции в стандартной формуле для коэффициента поглощения. Мы выбираем величину уширения $\Delta E = 1$ мэВ, что отвечает допустимым значениям для современных гетероструктур. Эта величина удовлетворяет соотношению $\Delta E << \Delta(\hbar \omega)$, где $\Delta(\hbar\omega) \approx 10$ мэВ есть типичное расстояние между уровнями Ландау. Таким образом, учёт конечного уширения уровней не приводит к существенному искажению в считывании положений дополнительных пиков поглощения, возникающих из-за гексагонального искажения в модели спектра. Частота первого максимума коэффициента поглощения для левополяризованной волны при *B*=10 T соответствует переходу $\Delta n=1$ и равна 5.4·10¹² с⁻¹. В случае падения левополяризованной волны (рис.4.39(a),(c)) помимо перехода $\Delta n=1$ существуют еще два перехода: с $\Delta n=4$ на частоте 2.2·10¹³ с⁻¹ и с $\Delta n=7$ на частоте 3.85·10¹³ с⁻¹. В случае падения правополяризованной волны (рис.4.39(b),(d)) наблюдается переход с $\Delta n=2$ на частоте 1.1·10¹³ с⁻¹ и переход с $\Delta n=5$ на частоте 2.8·10¹³ с⁻¹. Полученные максимумы на графике поглощения отвечают правилам отбора, связанным с симметрией электронных состояний. В отсутствии магнитного поля спектр поверхностных состояний (1.54) с учётом гексагонального искажения обладает осью симметрии C_6 .



Рисунок 4.39. Зависимость коэффициента поглощения (4.118) (в относительных единицах) от частоты падающей электромагнитной волны и величины квантующего магнитного поля (а) для левополяризованной волны и (b) для правополяризованной волны. (c),(d) зависимость коэффициента поглощения от частоты при величине магнитного поля B=10 T для лево- и правополяризованной волны соответственно. Величина $\overline{\omega} = 10^{13}$ с⁻¹. Учёт слагаемых с гексагональной симметрией в гамильтониане приводит к появлению новых пиков для излучения с различной поляризацией, отсутствовавших в изотропной модели [38].

Наложение постоянного магнитного поля приводит к понижению симметрии до C_3 . Эти оси симметрии определяют переходы на (6±1) и (3±1) уровней Ландау, в зависимости от поляризации волны, которые отсутствуют в изотропной модели спектра. Таким образом, учёт слагаемых с гексагональной симметрией в гамильтониане является существенным, поскольку приводит к качественным эффектам в частотной зависимости коэффициента поглощения, а именно, к излучения различной поляризацией, появлению новых пиков для с отсутствовавших в изотропной модели. Подобные эффекты могут наблюдаться в экспериментах спектроскопии уровней Ландау трёхмерных ПО для топологических изоляторов.

4.8.4. Выводы по п.4.8

Мы рассматривали известную структуру гамильтониана (1.54) для поверхностных состояний в ТИ Ві2Те3, содержащего кубическое слагаемое, которому отвечает гексагональное искажение в спектре. Это искажение, как мы обнаружили, оказывает качественное влияние на структуру волновых функций на уровнях Ландау и его проявление в особенностях динамики волновых пакетов в квантующем магнитном поле, а также в частотной зависимости коэффициента оптического поглощения. Для последней задачи в зависимости от поляризации падающей волны в спектре поглощения появляются новые максимумы, отсутствующие в изотропной модели спектра. Можно надеяться, что обсуждаемые в этом параграфе эффекты могут проявляться в оптических и транспортных экспериментах с топологическими изоляторами, что позволит более точно определить параметры их зонной структуры.

4.9. Топологические свойства краевых состояний в электронном газе, находящемся в решётке висмута на подложке кремния

В п.3.5 главы 3 мы рассмотрели модель спектра поверхностных состояний в структуре с монослоем висмута на кремнии с очень большим расщеплением зон, обусловленным СОВ. Возникает вопрос, возможно ли в такой структуре существование краевых состояний, являющихся топологически защищёнными от рассеивания на немагнитных примесях, т.е. не является ли рассматриваемая система топологическим изолятором. В системах с сильным СОВ могут наблюдаться топологически нетривиальные состояния, например, описываемые ненулевым числом Черна [237]. В данном параграфе мы рассмотрим модель формирования краевых состояний в системе, спектр объёмных (двумерных с точки зрения размерности, но называемых объёмными для удобства отделения их от краевых) состояний в которой описан в п.3.5, а также вычислим топологический Z_2 инвариант для объёмных состояний, следуя методу, изложенному в п.1.6.4 главы 1. Будем показано, что объёмные состояния

характеризуются ненулевым Z_2 инвариантом, а краевые состояния имеют линейных при малых энергиях спектр, располагающийся в запрещённой зоне объёмных состояний. Таким образом, будет сделан вывод о наличии фазы ТИ у системы с монослоем атомов висмута на кремнии [146].

4.9.1. Модель краевых состояний

Мы построим модель краевых состояний, стартуя с модели объёмных состояний, развитой в п.3.5, следуя общепринятому методу для одномерных краевых состояний в двумерных ТИ, изложенному в известных публикациях [209], [169], [274], [165], [176], [182]. Предварительно мы убедимся, что в спектре объёмных состояний, показанном на рис.3.17 главы 3, есть запрещённая зона. Для этого построим его увеличенный фрагмент, показанный на рис.4.40.



Рисунок 4.40. Фрагмент спектра объёмных состояний в системе с монослоем висмута на кремнии, показанный на рис.3.17 главы 3. В спектре около энергии $E_F=1.5$ эВ существует запрещённая зона шириной ~0.2 эВ, выделенная заштрихованной областью на оси энергии [146].

Он показывает, что в спектре около энергии E_F =1.5 эВ существует запрещённая зона шириной ~0.2 эВ, выделенная заштрихованной областью на оси энергии. Мы

ожидаем увидеть спектр краевых состояний в области, в которую входит указанная запрещённая зона объёмных состояний. Мы будем рассматривать формирование краевых состояний в полосе из рассматриваемого материала, имеющей ширину *L* вдоль *Oy* и бесконечно протяжённую вдоль *Ox*. На границах полосы будут приняты часто используемые нулевые граничные условия [209], [169], [274], [165], [176], [182]

$$\Psi(x, y=\pm L/2)=0.$$
 (4.119)

Для краевых состояний, как правило, наблюдается экспоненциальная зависимость $\exp(\pm \Lambda y)$ волновой функции от координаты поперёк направления края, в данном случае от *y*. Это эквивалентно чисто мнимой проекции волнового вектора для этого направления: $k_y \rightarrow i\Lambda$. Будем искать решения уравнения Шрёдингера с гамильтонианом (3.38) для объёмного состояния $\Phi(x,y)$ в виде, отвечающем функции (3.40) с разложением по функциям (3.37), но с зависимостью $\exp(\Lambda y)$ вдоль *Оу*:

$$\Phi_{k_x\Lambda}(x,y) = e^{\Lambda y} F_{k_x\Lambda}(x), \qquad (4.120)$$

где функция, описывающая зависимость от направления *х* вдоль края, есть

$$F_{k_x\Lambda}(x) = \sum_n a_n(k_x, \Lambda) \varphi_{nk_x\Lambda}(x).$$
(4.121)

Как и функции (3.37), функции $\varphi_{nk_x\Lambda}(x)$ в (4.121) получены из стандартных двухкомпонентных спиноров (1.8), но теперь в них произведена замена *у*-компоненты квазиимпульса на $-i\Lambda$:

$$\varphi_{nk_x\Lambda}(x) = \frac{\exp(i(k_x + nG)x)}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ \mp i \operatorname{sign}(k_x + nG + \Lambda) \end{pmatrix}.$$
(4.122)

Суммирование в (4.121) производится по одномерному направлению, отвечающему движению вдоль Ox и задаваемому векторами \vec{G}_1 и \vec{G}_4 гексагональной зоны Бриллюэна на рис.3.16. Параметр G=10.8 нм⁻¹ есть длина вектора обратной решётки. Волновая функция (4.120) является блоховской функцией вдоль направления края Ox, $\Phi_{k_x\Lambda}(x+a,y) = \exp(ik_xa)\Phi_{k_x\Lambda}(x,y)$, в то время как в поперечном направлении решение описывается экспонентами

 $\exp(\pm \Lambda y)$. После подстановки функции (4.120)-(4.122) в стационарное уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (3.38) мы получим спектр краевого состояния $E=E(k_x, \Lambda)$. Далее нам необходимо построить волновую функцию, удовлетворяющую граничным условиям (4.119) на краях полосы. Решая дисперсионное уравнение, для заданной энергии $E=E(k_x, \Lambda)$ в запрещённой зоне объёмных состояний на рис.4.40 мы имеем два значения обратной длины $\Lambda_{1,2}$. Мы можем построить линейную комбинацию функций вида (4.120) с такими $\Lambda_{1,2}$:

$$\Psi_{k_x}(x,y) = \sum_{\Lambda} c_{\Lambda} \Phi_{k_x \Lambda}(x,y), \qquad (4.123)$$

коэффициенты в которой будут найдены из граничных условий (4.119). Спектр двух ветвей краевых состояний $E_{1,2}=E_{1,2}(k_x)$ при $\Lambda=6$ нм⁻¹ показан на рис.4.41(а) на фоне спектра объёмных состояний. Картина спектра на рис.4.41(а) отвечает достаточно типичному случаю краевых состояний в обычных ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe ([120], [209], [58]), которые были базой для основной части задач этой главы диссертации. Мы видим две ветви спектра практически с линейным законом дисперсии в запрещённой зоне объёмных состояний, каждой из которых отвечает различная проекция спина S_v, отмеченная стрелкой и соответственно направление групповой скорости, определяющее различное направление движения вдоль края: на ветви (1) электроны движутся слева направо, если стоять лицом к краю, а на ветви (2) – справа налево. На панели (b) рис.4.41 показана зависимость энергии краевых состояний от Λ для $k_x=0.5$ нм⁻¹. Видно, что для данной энергии и фиксированного k_x, отличного от нуля, существуют два значения ± $\Lambda_{1,2}$, т.е. две пары корней дисперсионного уравнения, отличающихся знаком. Фрагмент структуры двух ветвей $E_{1,2}=E_{1,2}(k_x, \Lambda)$, пересекающихся по линии k_x=0, показан на вставке в панели (b). На панели (c) показана геометрия краевых состояний (4.123) как функция у, иллюстрирующая их локализацию вблизи края $y=\pm L/2$ с выполнением граничного условия (4.119) для значения L=10нм и энергии $E=E_F=1.5$ eV. Для каждого края есть два состояния соответственно знаку $\pm \Lambda$, локализованные в отрицательной или положительной области координаты у.



Рисунок 4.41. (а) Спектр краевых состояний (4.123) как функция k_x при $\Lambda=6$ нм⁻¹. Видны две ветви (1) и (2) с линейным законом дисперсии в запрещённой зоне объёмных состояний, показанных серым фоном. (b) Зависимость энергии краевых состояний от Λ для $k_x=0.5$ нм⁻¹. Для данной энергии существуют два значения $\Lambda_{1,2}$. Фрагмент структуры двух ветвей $E_{1,2}=E_{1,2}(k_x, \Lambda)$, пересекающихся по линии $k_x=0$, показан на вставке. (c) Геометрия краевых состояний (4.123) как функция y, показывающая их локализацию вблизи края $y=\pm L/2$. Для каждого края есть два состояния, которым отвечают ветви спектра (1) и (2) на панели (а), состояния которых распространяются в противоположных направлениях вдоль Ox и имеют противоположные проекции спина S_y [146].

Этим состояниям отвечают ветви спектра (1) и (2) на панели (а), состояния которых распространяются в противоположных направлениях вдоль Ox и имеют противоположные проекции спина S_{y} .

Нетрудно получить явный вид волновых функций на рис.4.41(c), удовлетворяющих граничным условиям (4.119). Для левого по ходу возрастания координаты *x* на рис.4.41(c) края *y*=–*L*/2 решения имеют вид

$$\begin{cases} \Psi_{L}^{(1)} = F_{k_{x}\Lambda_{1}}(x) \{ \exp(\Lambda_{1}y) - \exp[(\Lambda_{1} - \Lambda_{2})L/2 + \Lambda_{2}y] \}, \\ \Psi_{L}^{(2)} = F_{k_{x}\Lambda_{2}}(x) \{ \exp(\Lambda_{2}y) - \exp[(\Lambda_{2} - \Lambda_{1})L/2 + \Lambda_{1}y] \}, \end{cases}$$
(4.124)

а для правого края у=L/2 решения записываются в виде

$$\begin{cases} \Psi_{R}^{(1)} = F_{k_{x} - \Lambda_{1}}(x) \{ \exp(-\Lambda_{1}y) - \exp[(\Lambda_{2} - \Lambda_{1})L/2 - \Lambda_{2}y] \}, \\ \Psi_{R}^{(2)} = F_{k_{x} - \Lambda_{2}}(x) \{ \exp(-\Lambda_{2}y) - \exp[(\Lambda_{1} - \Lambda_{2})L/2 - \Lambda_{1}y] \}. \end{cases}$$
(4.125)

Таким образом, каждому краю y=-L/2 и y=L/2 отвечает пара решений, для которых скорость $v_x=\partial E/\partial(\hbar k_x)$ распространения вдоль края и проекции спина S_y противоположны друг другу. Существование таких состояний в запрещённой зоне объёмного спектра, видимой на рис.4.41(а), является необходимым, но не достаточным условием их топологической защищённости и тем самым наличия признака ТИ в рассматриваемой системе. Для этого нам нужно рассмотреть топологические свойства самих объёмных состояний, что будет обсуждаться в следующем пункте.

4.9.2. Топологические свойства объёмных состояний и Z₂ инвариант

В этом пункте мы будем исследовать топологические свойства объёмных состояний электронов в монослое висмута на кремнии, следуя методу, описанному в п.1.6.4 [130]. Именно, мы рассмотрим поведение пфаффиана (1.52) в гексагональной зоне Бриллюэна нашей системы, показанной на рис.3.16. Если уровень Ферми находится, как это показано на рис.4.40, в щели, ниже которой заняты состояния в зонах 1 и 2, то пфаффиан (1.52) вычисляется в виде матричного элемента $P_{12}(k_x, k_y)$ оператора обращения времени (1.50)

 $\Theta = \exp(i\pi S_y)K$, где S_y есть оператор *y*-проекции спина (в единицах \hbar) и *K* есть оператор комплексного сопряжения:

$$P(\vec{k}) = \left\langle u_1(\vec{k}) | \Theta | u_2(\vec{k}) \right\rangle, \qquad (4.126)$$

где $u_{1,2}(\vec{k})$ есть зависящие от квазиимпульса блоховские части волновой функции в зонах 1 и 2 соответственно. Нас будут интересовать нули пфаффиана (4.126) в зоне Бриллюэна, т.е. поведение его модуля. На рис.4.42 показана зависимость $\left| P(ec{k})
ight|$ в гексагональной зоне Бриллюэна для различных амплитуд потенциала V_0 и параметра Рашбы а_R в гамильтониане (3.38), (3.39), чтобы убедиться, что исследуемые топологические свойства объёмных состояний стабильны при изменениях его параметров. На рис.4.42 на панели (а) $V_0 = 0.3$ эВ, $\alpha_R = 110$ мэВ·нм, на панели (b) $V_0 = 0.6$ эВ, $\alpha_R = 110$ мэВ·нм, на панели (c) $V_0 = 0.3$ эВ, $\alpha_R = 60$ мэВ·нм. Можно видеть, что структура модуля пфаффиана (4.126) для всех случаев получается схожей, хотя глубина изменения параметров достигает 50%. Более конкретно, всего имеется шесть нулей, по числу угловых точек зоны Бриллюэна, обозначенных на рис.4.42 чёрными кружками. В то же время $|P(\vec{k})| = 1$ в инвариантных точках Г и М, обозначенных на рис.4.42 голубым и зелёным цветом соответственно. Число пар нулей пфаффиана, т.е. чёрных кружков, во всех трёх случаях на рис.4.42 случае нечётное, n=3. Это говорит о топологической нетривиальности спектра объёмных состояний и значении Z₂ инварианта, равном единице. В свою очередь, это означает [120], [209], [58], [130], [196], что имеется фаза топологического изолятора в электронном газе на поверхности монослоя атомов висмута на кремнии, а показанные на рис.4.41 краевые состояния на краях полосы конечной ширины обладают свойством топологической защищённости. Полученный вывод, как это иллюстрирует рис.4.42, справедлив для весьма широких изменений параметров V₀, α_R гамильтониана (3.38), что говорит об устойчивости предсказанной фазы ТИ в рассматриваемой системе.



Рисунок 4.42. Зависимость модуля пфаффиана (4.126) от квазиимпульса в гексагональной зоне Бриллюэна для различных амплитуд потенциала V_0 и параметра Рашбы α_R в гамильтониане (3.38), (3.39): (a) $V_0 = 0.3$ эВ, $\alpha_R = 110$ мэВ·нм; (b) $V_0 = 0.6$ эВ, $\alpha_R = 110$ мэВ·нм; (c) $V_0 = 0.3$ эВ, $\alpha_R = 60$ мэВ·нм. Число пар нулей во всех случае нечётное, n=3, что говорит о топологической нетривиальности спектра и значении Z_2 инварианта, равном единице [146].

Подводя итог данному параграфу, можно сделать вывод, что в системе электронов в монослое висмута на кремнии, характеризующимся очень большим параметром СОВ, в геометрии полосы конечной ширины существуют краевые состояния, характеризующиеся линейным законом дисперсии в запрещённой зоне объёмного материала. Свойства спектра последнего, в свою очередь, включают ненулевое значение Z₂ инварианта, вычисленного по зависимости пфаффиана для двух заполненных зон в гексагональной зоне Бриллюэна. Совокупность этих двух результатов позволяет классифицировать двумерный электронный газ в монослое висмута на кремнии как ещё один пример двумерного топологического изолятора с одномерными краевыми состояниями. Несмотря на то, ЧТО недавние теоретические и экспериментальные работы по данной системе [200], [188] не обнаружили прямых свидетельств в пользу наличия в ней фазы ТИ, в отличие от системы с двойным слоем (bilayer) висмута [196] или в висмутене на карбиде кремния [217], можно надеяться, что интерес к этому потенциальному кандидату на роль нового ТИ сохранится, и работы в этой области будут продолжены.

Выводы по главе 4

В заключительной главе 4 диссертации мы рассматривали свойства структур, созданных на основе топологических изоляторов, прежде всего квантовых точек, образованных на крае двумерного ТИ на базе КЯ HgTe/CdTe магнитными барьерами. Была развита и обоснована микроскопическая модель таких состояний, построенная исходя из представлений о взаимодействии краевого состояния с макроскопическим магнитом как с ансамблем сонаправленных индивидуальных магнитных моментов. Были исследованы состояния дискретного и непрерывного спектров, а также локализованные состояния в двойной КТ, образованной тремя магнитными барьерами. Были исследованы параметры релаксации энергии в таких КТ, полученные при рассмотрении их взаимодействия с акустическими фононами, в том числе с учётом переходов в состояния непрерывного спектра. Далее были рассмотрены модели для расчёта времени жизни квазистационарных состояний в КТ с учётом конечной проницаемости барьеров. Было обнаружено, что для умеренной толщины барьера выше 150 нм время жизни более чем на три порядка превышает типичное время управления заселённости состояний в периодическом электрическом поле, что для динамических задач позволяет считать барьеры непроницаемыми.

Динамические задачи с исследованием спиновой плотности в этой главе были сконцентрированы на воздействии периодического электрического поля на локализованные состояния в КТ на частоте расщепления дублета в КТ, в результате чего помимо переворота спина индуцировались переходы в непрерывный спектр. Были рассчитаны оптимальные параметры достаточно быстрого переворота спина с сохранением локализации в области КТ. Далее была рассмотрена регулярная и нерегулярная динамика в массивной КТ со многими дискретными уровнями, где стандартными методами квантовой хаотической динамики были обнаружены признаки квантовой диффузии Арнольда в пространстве состояний.

Исследования в данной главе не ограничились двумерными ТИ. Была рассмотрена динамика волновых пакетов на двумерном крае трёхмерного ТИ на базе Bi_2Te_3 , в том числе с рассеиванием пакетов на магнитном и немагнитном барьере. Было обнаружено, что для гауссового по форме волнового пакета энергетическая и угловая зависимость коэффициента прохождения значительно отличаются от таковых для состояний типа плоской волны. Именно, в силу наличия в пакете большого числа гармоник с различным направлением волновых векторов коэффициенты прохождения в среднем меньше, чем для плоской волны, в том числе для немагнитного барьера, что может служить идеей для локализации таких состояний на поверхности ТИ. Кроме того, для поверхностных краевых состояний в Bi_2Te_3 были рассмотрены особенности влияния гексагонального искажения спектра на структуру состояний на уровнях Ландау, а также на циклотронную динамику волновых пакетов и на структуру коэффициента поглощения электромагнитного излучения. Был обнаружен ряд особенностей,

обусловленных кубическими членами в гамильтониане, т.е. гексагональным искажением спектра, которые могут служить ключом для экспериментального определения параметров такого искажения.

В заключительном параграфе главы 4 были рассмотрены краевые состояния, формирующиеся на крае полосы конечной ширины в материале, представляющем собой слой атомов висмута на подложке кремния. В таком материале спектр характеризуется большой величиной СОВ. Было показано, что формирующиеся краевые состояния характеризуются линейным законом дисперсии в запрещённой зоне спектра объёмных (двумерных) состояний, что характерно для фазы ТИ в таком материале. Это предположение было подтверждено расчётом Z_2 инварианта на основе анализа пфаффиана по заполненным состояниям двух зон спектра объёмных состояний, которые показали, что имеется нечётное число пар нулей пфаффиана, характерное для фазы ТИ. Таким образом, был предсказан новый тип двумерного ТИ в электронном газе в монослое висмута на подложке кремния.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя явлений ИТОГ исследованию динамических ДЛЯ спина И туннелирования рассмотренных низкоразмерных структурах основе В на полупроводников А(3)В(5) и топологических изоляторов, можно сделать следующие выводы, описывающие основные результаты диссертационной работы:

- Показано, что учёт многоуровневого характера спектра в двойных квантовых точках приводит к существенным отличиям картины осцилляций спиновой проекции от классической для двухуровневой системы при электрическом дипольном спиновом резонансе. Для ряда задач обнаружена нелинейная зависимость частоты переворота спина (частоты Раби) от амплитуды электрического поля. Показано, что существуют области параметров как с уменьшением, так и с увеличением частоты переворота спина по сравнению с двухуровневым приближением.
- Методами квантовой теории оптимального управления получены профили импульса электрического поля, позволяющие ускорить переворот спина в двойной квантовой точке в рамках эффекта электрического дипольного спинового резонанса на 1-2 порядка по сравнению с монохроматическим полем.
- 3. Для квантовой точки вида прямоугольного квантового биллиарда с большим числом участвующих в эволюции уровней при добавлении спин-орбитального взаимодействия и учёта большого числа уровней в магнитном поле обнаружены проявления квантового хаоса в динамике наблюдаемых величин. В частности, обнаружены ослабление со временем корреляций между пространственными распределениями плотности вероятности и спиновой плотности, причём степень ослабления растёт с ростом амплитуды спинорбитального взаимодействия.

- 4. Построена модель электрического дипольного резонанса при учёте состояний непрерывного спектра в мелкой и глубокой квантовой точках в нанопроволоке, когда наряду с осцилляциями спина большую роль начинают играть процессы туннелирования в непрерывный спектр. Аналитически и численно рассчитаны времена ионизации, устанавливающие порог по времени работы с локализованными состояниями в периодическом электрическом поле.
- 5. Обнаружены новые режимы туннелирования и спиновой эволюции в двойной квантовой точке, в том числе «гибридный» резонанс, при котором все виды процессов происходят в одной точке пространства параметров системы и который не сводится к двухуровневому приближению, а требует как минимум четырёхуровневой модели.
- 6. Показана возможность увеличения скорости переворота спина в рамках механизма электрического дипольного спинового резонанса (ЭДСР) в одной квантовой точке при наличии туннельной связи с соседней точкой. Показано, что управляемые вращения спина возможны не только на основой, но и на высоких субгармониках ЭДСР, в том числе с поворотом плоскости вращения спина, что позволяет реализовать основные операции квантовых вычислений на сфере Блоха.
- 7. Разработаны модели квантовых состояний и исследованы распределения спиновой плотности в сверхрешётках со спин-орбитальным взаимодействием. Найдены распределения спиновой плотности при рассеивании набора спинполяризованных плоских волн на сверхрешётке, при облучении электромагнитным излучением терагерцового диапазона, при приложении постоянного электрического поля и протекании тока.
- 8. Построена модель кинетики фотолюминесценции в квантовой яме с монослоем марганца, магнитные моменты которого взаимодействуют со спинами дырок в яме, в которой имеются резидентные электроны, под действием импульсом лазера с различной поляризацией. С помощью данной

модели объяснён экспериментально наблюдаемый эффект «спиновой памяти» при взаимодействии спинов дырок со спинами марганца.

- Разработана микроскопическая модель локализованных состояний и состояний непрерывного спектра в квантовой точке на крае топологического изолятора, созданной на базе квантовой ямы HgTe/CdTe макроскопическими магнитными барьерами конечной высоты.
- 10. В модели квантовой точки на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe найдены параметры энергетической релаксации при учёте электрон-фононного взаимодействия для различных температур и различных ветвей спектра электронов и фононов, включая краевые состояния непрерывного спектра и состояния объёмной части образца.
- 11. Получены времена жизни квазистационарных состояний в квантовой точке с магнитными барьерами конечной проницаемости на крае топологического изолятора на базе КЯ HgTe/CdTe, которые свидетельствуют о возможности проведения операций с заселённостью дискретных уровнях на временах, на три порядка меньших по сравнению с найденными временами жизни.
- 12. Определены оптимальные параметры электрического поля для управления заселённостями уровней в квантовой точке на базе топологического изолятора, при которых быстрая смена заселённостей на временах, существенно меньших времени релаксации, не сопровождается заметной «утечкой» в континуум.
- 13. В модели широкой квантовой точки со многими дискретными уровнями на крае топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe обнаружена иррегулярная динамика с признаками квантового хаоса. В частности, наблюдается диффузия в пространстве состояний (квантовая диффузия Арнольда).
- 14. Найдены зависимости коэффициента прохождения для динамической и статической задачи о взаимодействии волнового пакета из краевых состояний в топологическом изоляторе семейства Bi₂Te₃ с потенциальными барьерами, в том числе с барьерами с намагниченностью. Показано, что для двумерных

пакетов наблюдается сильное подавление эффекта клейновского туннелирования при определённых условиях, что способствует их локализации.

- 15. С учётом гексагонального искажения спектра исследована циклотронная динамика волновых пакетов и получена частотная зависимость коэффициента поглощения в магнитном поле для поверхностных состояний в топологическом изоляторе семейства Bi₂Te₃. Показано, что учёт кубических слагаемых приводит к появлению новых пиков на Фурье-спектре средней скорости пакета и новых пиков на зависимости коэффициента поглощения, что может служить для экспериментального определения параметров зонной структуры.
- 16. Построена модель объёмных и краевых состояний для электронов в монослое висмута на кремнии в фазе тримера (бета-фазе). Для объёмных состояний вычислен Z₂ инвариант, значение которого равно единице, что позволяет классифицировать данную систему в рамках используемой модели как двумерный топологический изолятор.

СПИСОК ОСНОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

- КТ квантовая точка
- КЯ квантовая яма
- СОВ спин-орбитальное взаимодействие
- ТИ топологический изолятор
- ФЛ фотолюминесценция
- ЭДСР электрический дипольный спиновый резонанс
- с скорость света
- е модуль элементарного заряда
- \vec{e}_i единичный вектор вдоль оси координат x_i
- \hbar постоянная Планка
- *m*₀ масса свободного электрона
- мэВ милиэлектронвольт
- мкэВ микроэлеткронвольт
- мкм микрометр
- нм нанометр
- нс наносекунда
- нА наноампер
- пА пикоампер
- эВ элекронвольт
- с-секунда
- S_i *i*-я компонента спиновой плотности
- σ_i -*i*-я компонента спиновой поляризации

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Андо, Т. Электронные свойства двумерных систем / Т. Андо, А. Фаулер,
 Ф. Стерн // М.: Мир. – 1985. – 416 с.

 Ансельм, А.И. Введение в теорию полупроводников / А.И. Ансельм // М.: Наука. – 1978. – 616 с.

3. Базь, А.И. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов // М.: Наука, 1971. – 544 с.

4. Берестецкий, В.Б. Квантовая электродинамика / В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский // М.: Наука. – 1989. – 728 с.

 Бир, Г.Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г.Л. Бир и Г.Е. Пикус // М.: Наука. – 1972. – 584 с.

 Блум, К. Теория матрицы плотности и ее приложения / К. Блум // М.: Мир. – 1983. – 248 с.

7. Булгаков, Е.Н. Статистика собственных функций хаотических биллиардов с учетом спин-орбитального взаимодействия Рашбы / Е.Н. Булгаков, А.Ф. Садреев // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2003. – Т.78, вып.7. – С.911.

8. Бычков, Ю.А. Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра / Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1984. – Т.39, вып.2. – С.66.

9. Вентцель, Е.С. Теория вероятностей / Е.С. Вентцель // М.: Высшая школа. – 1998. – 576 с.

Вугальтер, Г.А. Полупроводниковые сверхрешётки. Методическая разработка по специальному курсу «Физические основы современной микроэлектроники». Часть 2 / Г.А. Вугальтер, В.А. Бурдов // Н. Новгород: ННГУ. – 1999. – 52 с.

11. Гантмахер, В.Ф. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках / В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон // М.: Наука. – 1984. – 352 с.
12. Делоне, Н.Б. Атом в сильном световом поле / Н.Б. Делоне, В.П. Крайнов // М.: Энергоатомиздат. – 1984. – 224 С.

13. Делоне, Н.Б. Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением / Н.Б. Делоне, В.П. Крайнов // М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2001. – 320 С.

14. Демиховский, В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер // М.: Логос, 2000. – 248 с.

15. Демиховский, В.Я. Низкоразмерные структуры спинтроники / В.Я. Демиховский // Нижний Новгород: Издательство Нижегородского госуниверситета, 2007. – 126 с.

16. Демиховский, В.Я. Периодические структуры со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, А.А. Перов // Физика низких температур. – 2007. – Т.33, №2/3 – С.165.

 17. Ди Джакомо, Ф. Формула Майораны и задача Ландау-Зинера-Штюкельберга о квазипересечении уровней / Ф. Ди Джакомо, Е.Е. Никитин // Успехи физических наук. – 2005. – Т.175. – № 5.– С.545.

Дорохин, М.В. Методы управления спиновой инжекцией в спиновых светоизлучающих диодах InGaAs/GaAs/Al₂O₃/CoPt / М.В. Дорохин, М.В. Ведь, П.Б. Дёмина, А.В. Здоровейщев, А.В. Кудрин, А.В. Рыков, Ю.М. Кузнецов // Физика твёрдого тела. – 2017. – Т.59., вып.11. – С.2135.

19. Дроздов, Ю.Н. Сегрегация индия при выращивании квантовых ям InGaAs/GaAs в условиях газофазной эпитаксии / Ю.Н. Дроздов, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков, М.Н. Дроздов, О.И. Хрыкин, В.И. Шашкин // Физика и техника полупроводников. – 2003. – Т.37. – Вып.2. – С.203.

20. Дымников, В.Д. Время жизни квазистационарного состояния электрона в двухбарьерной гетероструктуре / В.Д. Дымников, О.В. Константинов // Физика и техника полупроводников. – 1994. – Т.28. – Вып.5. – С.844.

21. Зайцев, С.В. Ферромагнитное воздействие δ-<Мn>-слоя в GaAs барьере на спиновую поляризацию носителей в InGaAs/GaAs квантовой яме / С.В. Зайцев, М.В. Дорохин, А.С. Бричкин, О.В. Вихрова, Ю.А. Данилов, Б.Н. Звонков, В.Д. Кулаковский // Письма в ЖЭТФ. – 2009. – Т.90. – Вып.10. – С.730.

22. Захарченя, Б.П. Оптическая ориентация // под ред. Б.П. Захарчени, Ф. Майера. Ленинград: Наука (ленинградское отделение). – 1989. – 408 с.

23. Захарченя, Б.П. Интегрируя магнетизм в полупроводниковую электронику / Б.П. Захарченя, В.Л. Коренев // Успехи физических наук. – 2005. – Т.175. – № 6. – С.629.

24. Келдыш, Л.В. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны / Л.В. Келдыш // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1964. – Т.47, вып.5. – С.1945.

25. Кунин, С. Вычислительная физика / С. Кунин // М.: Мир, 1992. – 518 с.

26. Лаврухина, Е.А. Формирование связанных состояний и управление их локализацией в двойной квантовой точке на крае двумерного топологического изолятора с магнитными барьерами / Е.А. Лаврухина, Д.В. Хомицкий, А.В. Тележников // Физика и техника полупроводников.– 2023. – Т.57, вып.7. – С.551.

27. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // М.: Наука. – 1989. – 768 с.

28. Максимова, Г.М. Электронные состояния и персистентные токи в кольцах с неоднородным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы / Г.М. Максимова, А.Р. Зайнагутдинов, А.В. Тележников // Физика и техника полупроводников. – 2021. – Т.55, вып.9. – С.719.

29. Малышев, А.И. Диффузия Арнольда в системе с 2.5 степенями свободы: классический и квантово-механический подходы / А.И. Малышев, Л.А. Чижова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2010. – Т.137, вып.5. – С.956.

30. Малышев, А.И. Влияние слабого магнитного поля на резонансные особенности проводимости открытого круглого биллиарда со спин-орбитальным

взаимодействием Дрессельхауза / А.И. Малышев, Г.Г. Исупова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2013. – Т.144, вып.6(12). – С.1260.

31. Малышев, А.И. Открытый квантовый биллиард в магнитном поле: идеальный спиновый фильтр / А.И. Малышев, Г.Г. Исупова // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т.148, вып.4(10). – С.778.

32. Меркин, Д.Р. Введению в теорию устойчивости движения / Д.Р. Меркин // М.: Наука. – 1987. – 304 с.

33. Переломов, А.М. Ионизация атомов в переменном электрическом поле. І. / А.М. Переломов, В.С. Попов, М.В. Терентьев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1966(а). – Т.50, вып.5. – С.1393.

34. Переломов, А.М. Ионизация атомов в переменном электрическом поле. II. / А.М. Переломов, В.С. Попов, М.В. Терентьев // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1966(б). – Т.51, вып.2. – С.309.

Рашба, Э.И. Свойства полупроводников с петлёй экстремума.
 Циклотронный и комбинированный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли. / Э.И. Рашба // Физика твёрдого тела – 1960.
 Т.2, № 6. – С.1224.

36. Сатанин, А.М. Динамика электронов в наноструктурах / А.М. Сатанин // Нижний Новгород, издательство ННГУ им. Н.И. Лобачевского. – 2006. – 96 с.

37. Скалли, М.О. Квантовая оптика / М.О. Скалли, М.С. Зубайри //
 М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2003. – 512 с.

38. Туркевич, Р.В. Динамика электронных состояний и магнитопоглощение в трёхмерных топологических изоляторах в квантующем магнитном поле // Р.В. Туркевич, Д.В. Хомицкий // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2018. – Т.153, вып.2. – С.283.

39. Херман, М. Полупроводниковые сверхрешётки / М. Херман // М.: Мир. – 1989. – 240 с.

40. Хомицкий, Д.В. Расчёт энергетических зон, спиновой поляризации и транспорта в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием:

методические указания к лабораторной работе / Д.В. Хомицкий // Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского. – 2006. – 17 С.

41. Хомицкий, Д.В. Немагнитная спинтроника: моделирование спиновых текстур в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием / Д.В. Хомицкий // Наноструктуры, математическая физика и моделирование. – 2009. – Т.1, №1. – С.83.

42 Хомицкий, Д.В. Физические основы методов управления спиновой плотностью в наноструктурах спинтроники: учебно-методическое пособие / Д.В. Хомицкий // Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского. – 2011. – 94 с.

43. Хомицкий, Д.В. Релаксация энергии в квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора / Д.В. Хомицкий, Е.А. Лаврухина, А.А. Чубанов, Н. Нжийа // Физика и техника полупроводников. – 2017. – Т.51, вып.11. – С.1557.

44. Хомицкий, Д.В. Спиновый резонанс в квантовой точке на краю топологического изолятора при учёте состояний континуума / Д.В. Хомицкий, К.С. Кабаев, Е.А. Лаврухина // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. – Т.158, вып.5(11). – С.929.

45. Хомицкий, Д.В. Рассеивание волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов в присутствии потенциальных барьеров с намагниченностью / Д.В. Хомицкий, Д.А. Кулаков // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. – Т.157, вып.1. – С.20.

46. Хомицкий, Д.В. Спин-зависимое туннелирование в двойной квантовой точке в режиме «медленной» эволюции / Д.В. Хомицкий, Н.А. Запруднов // Физика и техника полупроводников. – 2022. – Т.56, вып.10. – С.973.

47. Штокман, Х.-Ю. Квантовый хаос: введение (Под ред. В.Я. Демиховского; Пер. с англ. А.И. Малышева) / Х.-Ю. Штокман // М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2004. – 376 с.

48. Юрасов, Д.В. Критическая толщина перехода по Странскому-Крастанову с учетом эффекта сегрегации / Д.В. Юрасов, Ю.Н. Дроздов // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т.42. – Вып.5. – С.579.

49. Akimov, I.A. Long-range p-d exchange interaction in a ferromagnetsemiconductor Co/CdMgTe/CdTe quantum well hybrid structure / I.A. Akimov, M. Salewski, I.V. Kalitukha, S.V. Poltavtsev, J. Debus, D. Kudlacik, V.F. Sapega, N.E. Kopteva, E. Kirstein, E.A. Zhukov, D.R. Yakovlev, G. Karczewski, M. Wiater, T. Wojtowicz, V.L. Korenev, Yu.G. Kusraev, and M. Bayer // Physical Review B. – 2017. – V.96. – P.184412.

50. Allain, P. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons / P.E. Allain and J.-N. Fuchs // European Physical Journal B. – 2011. – V.88. – P.301.

51. Balanta, M.A.G. Optically controlled spin-polarization memory effect on Mn delta-doped heterostructures / M.A.G. Balanta, M.J.S.P. Brasil, F. Ikawa, U.C. Mendes, J.A. Brum, Yu.A. Danilov, M.V. Dorokhin, O.V. Vikhrova and B.N. Zvonkov // Scientific Reports. – 2016. – V.6. – P.24537.

52. Ban, Y. Time scales of tunneling decay of a localized state / Y. Ban, E.Ya. Sherman, J.G. Muga, and M. Büttiker // Physical Review A. – 2010. – V.82. – P.062121.

53. Ban, Y. Fast and Robust Spin Manipulation in a Quantum Dots by Electric Fields / Y. Ban, X. Chen, E.Ya. Sherman, and J.G. Muga // Physical Review Letters. – 2012. – V.109. – P.206602.

54. Bauer, D. Exact field ionization rates in the barrier-suppression regime from numerical time-dependent Schrödinger-equation calculations / D. Bauer and P. Mulser // Physical Review A. – 1999. – V.59. – P.569.

55. Bell, R.L. Electric dipole spin transitions in InSb / R.L. Bell // Physical Review Letters. – 1962. – V.9. – P.52.

56. Berggren, K.-F. Chaos in a Quantum Dot with Spin-Orbit Coupling / K.-F. Berggren and T. Ouchterlony // Foundations of Physics. – 2001. – V.31. – P.233.

57. Bernevig, B.A. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells / B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang // Science. – 2006. – V.314. – P.1757.

58. Bernevig, B.A. Topological insulators and topological superconductors /
B.A. Bernevig with Taylor L. Hughes // Princeton: Princeton University Press. – 2013.
– 247 P.

59. Bhat, R.D.R. Pure Spin Current from One-Photon Absorption of Linearly Polarized Light in Noncentrosymmetric Semiconductors / R.D.R. Bhat, F. Nastos, A. Najmaie, and J.E. Sipe // Physical Review Letters. – 2005. – V.94. – P.096603.

60. Bogan, A. Landau-Zener-Stückelberg-Majorana Interferometry of a Single Hole // A. Bogan, S. Studenikin, M. Korkusinski, L. Gaudreau, P. Zawadzki, A.S. Sachrajda, L. Tracy, J. Reno and T. Hargett // Physical Review Letters. – 2018. – V.120. – P.207701.

61. Bonifacio, M. Landau-Zener-Stückelberg interferometry in dissipative circuit quantum electrodynamics / M. Bonifacio, D. Domínguez, and M.J. Sánchez // Physical Review B. – 2020. – V.101. – P.245415.

62. Brif, C. Control of quantum phenomena: past, present and future / C. Brif,
R. Chakrabarti and H. Rabitz // New Journal of Physics. – 2010. – V.12. – P.075008.

63. Brooks, M. Electric Dipole Spin resonance of 2D Semiconductor Spin Qubits /
M. Brooks and G. Burkard // Physical Review B. – 2020. – V.101. – P.035204.

64. Budagosky, J. Shaped electric fields for fast optimal manipulation of electron spin and position in a double quantum dot / J. Budagosky, D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman, A. Castro // Physical Review B. – 2016. – V.93. – P.035423.

65. Budagosky Marcilla, J.A. Ultrafast single electron spin manipulation in 2D semiconductor quantum dots with optimally controlled time-dependent electric fields through spin-orbit coupling / J.A. Budagosky Marcilla and A. Castro // The European Physical Journal B. -2015. -V.88. -P.15.

66. Bulaev, D.V. Electric Dipole Spin resonance for Heavy Holes in Quantum Dots / D.V. Bulaev and D. Loss // Physical Review Letters. – 2007. – V.98. – P.097202.

67. Bulgakov, E.N. Spin rotation for ballistic electron transmission induced by spin-orbit interaction / E.N. Bulgakov and A.F. Sadreev // Physical Review B. – 2002. – V.66. – P.075331.

68. Bulgakov, E.N. Statistics of wave functions and currents induced by spin-orbit interaction in chaotic billiards / E.N. Bulgakov and A.F. Sadreev // Physical Review E. -2004. - V.70. - P.056211.

69. Burdov, V.A. Dynamical control of electron states in double quantum dot / V.A. Burdov and D.S. Solenov // Physica E. – 2004. – V.24. – P.217.

70. Burkard, G. Coupled quantum dots as quantum gates / G. Burkard, D. Loss, and D.P. DiVincenzo // Physical Review B. – 1999. – V.59. – P.2070.

71. Büttiker, M. Traversal Time for Tunneling / M. Büttiker and R. Landauer // Physical Review Letters. – 1982. – V.49. – P.1739.

72. Cano, B.M. Experimental Demonstration of a Magnetically Induced Warping Transition in a Topological Insulator Mediated by Rare-Earth Surface Dopants / B. M. Cano, Y. Ferreiros, P. A. Pantaleón, J. Dai, M. Tallarida, A.I. Figueroa, V. Marinova, K. García-Díez, A. Mugarza, S.O. Valenzuela, R. Miranda, J. Camarero, F. Guinea, J. A. Silva-Guillén, and M.A. Valbuena // Nano Letters. – 2023. – V.23 – issue 13 – P.6249.

73. Castro, A. Controlling the Dynamics of Many-Electron Systems from First Principles: A Marriage of Optimal Control and Time-Dependent Density-Functional Theory / A. Castro, J. Werschnik, and E.K.U. Gross // Physical Review Letters. – 2012. – V.109. – P.153603.

74. Cho, S. Topological Insulator Quantum Dot with Tunable Barriers / S. Cho, D. Kim, P. Syers, N.P. Butch, J. Paglione, and M.S. Fuhrer // Nano Letters. – 2012. – V.12. – P.469.

75. Csontos, D. Spin-3/2 physics of semiconductor hole nanowires: Valence-band mixing and tunable interplay between bulk-material and orbital bound-state spin splitting / D. Csontos, P. Brusheim, U. Zülicke, and H.Q. Xu // Physical Review B. – 2009. – V.79. – P.155323.

76. Danon, J. Pauli spin blockade in the presence of strong spin-orbit coupling /
J. Danon and Yu.V. Nazarov // Physical Review B. – 2009. – V.80. – P.041301(R).

77. Datta, S. Electronic analog of the electro-optic modulator / S. Datta and B. Das// Applied Physics Letters. – 1990. – V.56. – P.665.

78. Debald, S. Rashba effect and magnetic field in semiconductor quantum wires /
S. Debald and B. Kramer // Physical Review B. – 2005. – V.71. – P.115322.

79. Demikhovskii, V.Ya. Multiphoton ionization of a quantum well / V.Ya. Demikhovskii and G.A. Vugalter // Journal of Physics: Condensed Matter. – 1996. – V.8. – P.2585.

80. Demikhovskii, V.Ya. Manifestation of the Arnol'd Diffusion in Quantum Systems / V.Ya. Demikhovskii, F.M. Izrailev and A.I. Malyshev // Physical Review Letters. – 2002. – V.88. – P.154101.

81. Demikhovskii, V.Ya. Quantum Arnol'd diffusion in a simple nonlinear system
/ V.Ya. Demikhovskii, F.M. Izrailev, and A.I. Malyshev // Physical Review E. – 2002. –
V.66. – P.036211.

82. Demikhovskii, V.Ya. Spin-orbit lateral superlattices: energy bands and spin polarization in 2DEG / V.Ya. Demikhovskii, D.V. Khomitsky // Письма в ЖЭТФ. – 2006 – Т.83, вып.8 – С.399.

83. Demikhovskii, V.Ya. Nonlinear electron dynamics in a rippled channel with time-dependent electric field: Quantum Arnol'd diffusion / V.Ya. Demikhovskii, F.M. Izrailev, and A.I. Malyshev // Physics Letters A. – 2006. – V.352. – P.491.

84. Demikhovskii, V.Ya. Space-time evolution of Dirac wave packets / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, A.A. Perov, and E.V. Frolova // Physical Review A. – 2010. – V.82. – P.052115.

85. Demikhovskii, V.Ya. The long-term cyclotron dynamics of relativistic wave packets: spontaneous collapse and revival / V.Ya. Demikhovskii, G.M. Maksimova, A.A. Perov, and A.V. Telezhnikov // Physical Review A. – 2012. – V.85. – P.022105.

86. Dietl, T. Spintronics / T. Dietl, D.D. Awschalom, M. Kaminska and H. Ohno // New York: Academic Press, 2008. – 522 P. 87. Dolcetto, G. Coulomb blockade microscopy of spin-density oscillations and fractional charge in quantum spin Hall dots / G. Dolcetto, N. Traverso Ziani, M. Biggio, F. Cavaliere, and M. Sassetti // Physical Review B. – 2013. – V.87. – P.235423.

88. Dolcini, F. Photoexcitation of electron wave packets in quantum spin Hall edge states: Effects of chiral anomaly from a localized electric pulse / F. Dolcini, R.C. Iotti, A. Montorsi, and F. Rossi // Physical Review B. – 2016. – V.94. – P.165412.

89. Dolcini, F. Interplay between Rashba interaction and electromagnetic field in the edge states of a two-dimensional topological insulator / F. Dolcini // Physical Review $B_{.} - 2017_{.} - V_{.}95_{.} - P_{.}085434_{.}$

90. Dorokhin, M.V. Role of resident electrons in the manifestation of a spin polarization memory effect in Mn delta-doped GaAs heterostructures / M.V. Dorokhin, M.V. Ved, P.B. Demina, D.V. Khomitsky, K.S. Kabaev, M.A.G. Balanta, F. Ikawa, B.N. Zvonkov, and N.V. Dikareva // Physical Review B. – 2021. – V.104. – P.125309.

91. Dresselhaus, G. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blend Structures /
G. Dresselhaus // Physical Review – 1955. – V.100. – P.580.

92. Dyakonov, M.I. Spin physics in semiconductors / Ed. by M.I. Dyakonov // Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008. – 439 P.

93. Echanobe, J. Disclosing hidden information in the quantum Zeno effect: Pulsed measurement of the quantum time of arrival / J. Echanobe, A. del Campo, and J.G. Muga // Physical Review A. – 2008. – V.77. – P.032112.

94. Efimkin, D.K. Self-consistent theory of ferromagnetism on the surface of a topological insulator / D.K. Efimkin and V. Galitski // Physical Review B. – 2014. – V.89. – P.115431.

95. Eremeev, S.V. Magnetic proximity effect at the three-dimensional topological insulator/magnetic insulator interface / S.V. Eremeev, V.N. Men'shov, V.V. Tugushev, P.M. Echenique, and E.V. Chulkov // Physical Review B. – 2013. – V.88. – P.144430.

96. Ertler, C. Gate-defined coupled quantum dots in topological insulators /
C. Ertler, M. Raith, and J. Fabian // Physical Review B. – 2014. – V.89. – P.075432.

97. Fang, Y. Recent advances in hole-spin qubits / Y. Fang, P. Philippopoulos,
D. Culcer, W.A. Coish and S. Chesi // Materials for Quantum Technology. – 2023. –
V.3. – P.012003.

98. Fernández-Fernández, D. Quantum Control of Hole spin Qubits in Double Quantum Dots / D. Fernández-Fernández, Y. Ban, and G. Platero // Physical Review Applied. – 2022. – V.18. – P.054090.

99. Ferreira, G.J. Magnetically Defined Qubits on 3D Topological Insulators /
G.J. Ferreira and D. Loss // Physical Review Letters. – 2013. – V.111. – P.106802.

100. Fleckenstein, C. The chiral anomaly in real space / C. Fleckenstein, N. Traverso Ziani, and B. Trauzettel // Physical Review B. – 2016. – V.94. – P.241406(R).

101. Frantzeskakis, E. Tunable Spin Gaps in a Quantum-Confined Geometry /
E. Frantzeskakis, S. Pons, H. Mirhosseini, J. Henk, C.R. Ast, and M. Grioni // Physical Review Letters. – 2008. – V.101. – P.196805.

102. Frantzeskakis, E. Band structure scenario for the giant spin-orbit splitting observed at the Bi/Si(111) interface / E. Frantzeskakis, S. Pons, and M. Grioni // Physical Review B. – 2010. – V.82. – P.085440.

103. Fu, L. Time-reversal polarization and a Z_2 adiabatic spin pump / L. Fu and C.L. Kane // Physical Review B. -2006. - V.74. - P.195312.

104. Fu, L. Topological insulators with inversion symmetry / L. Fu and C.L. Kane // Physical Review B. – 2007. – V.76. – P.045302.

105. Fu, L. Hexagonal Warping Effects in the Surface States of the Topological Insulator / L. Fu // Physical Review Letters. – 2009. – V.103. – P.266801.

106. Ganichev, S.D. Spin-galvanic effect due to optical spin orientation in *n*-type GaAs quantum well structures / S.D. Ganichev, P. Schneider, V.V. Bel'kov, E.L. Ivchenko, S.A. Tarasenko, W. Wegscheider, D. Weiss, D. Schuh, B.N. Murdin, P.J. Philips, C.R. Pidgeon, D.G. Clarke, M. Merrick, P. Murzyn, E.V. Beregulin, and W. Prettl // Physical Review B. – 2003. – V.68. – P.081302 (R).

107. Ganichev, S.D. Intense Terahertz Excitation of Semiconductors /
S.D. Ganichev and W. Prettl // Oxford: Oxford University Press. – 2006. – 434 p.

108. Ganichev, S.D. Intense Terahertz Excitation of Semiconductors / S.D. Ganichev // Terahertz Science and Technology. – 2008. – V.1, No.3. – P.136.

109. Gierz, I. Silicon Surface with Giant Spin Splitting / I. Gierz, T. Suzuki, E. Frantzeskakis, S. Pons, S. Ostanin, A. Ernst, J. Henk, M. Grioni, K. Kern, and C.R. Ast // Physical Review Letters. – 2009. – V.103. – P.046803.

110. Giglberger, S. Rashba and Dresselhaus spin splitting in semiconductor quantum wells measured by spin photocurrents / S. Giglberger, L.E. Golub, V.V. Bel'kov, S.N. Danilov, D. Schuh, C. Gerl, F. Rohlfing, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl, and S.D. Ganichev // Physical Review B. – 2007. – V.75. – P.035327.

111. Glazov, M.M. Electron and Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures / M.M. Glazov // New York: Oxford University Press. – 2018. – 283 P.

112. Golovach, V.N. Electric-dipole-induced spin resonance in quantum dots /
V.N. Golovach, M. Borhani, and D. Loss // Physical Review B. - 2006. - V.74. P.165319.

113. Golub, L.E. Spin-splitting-induced photogalvanic effects in quantum wells /
L.E. Golub // Physical Review B. - 2003. - V.67. - P.235320.

114. Gómez-León, Á. Charge localization and dynamical spin locking in double quantum dots driven by ac magnetic fields / Á. Gómez-León and G. Platero // Physical Review B. - 2011. - V.84. - P.121310(R).

115. Governale, M. Spin accumulation in quantum wires with strong Rashba spinorbit coupling / M. Governale and U. Zülicke // Physical Review B. – 2002. – V.66. – P.073311.

116. Grifoni, M. Driven quantum tunneling / M. Grifoni and P. Hänggi // Physics Reports. – 1998. – V.304. – P.229.

117. Grossmann, F. Coherent destruction of tunneling / F. Grossmann, T. Dittrich,
P. Jung, and P. Hänggi // Physical Review Letters. – 1991. – V.67. – P.516.

118. Grundler, D. Large Rashba Splitting in InAs Quantum Wells due to Electron Wave Function Penetration into the Barrier Layers / D. Grundler // Physical Review Letters. – 2000. – V.84. – P.6074.

119. Gutzwiller, M.C. Chaos in Classical and Quantum Mechanics / M.C. Gutzwiller // New York: Springer-Verlag. – 1990. – 432 P.

120. Hasan, M.Z. *Colloquium*: Topological insulators / M.Z. Hasan, C.L. Kane // Reviews of Modern Physics. – 2010. – V.82. – P.3045.

121. Hirahara, T. Quantum well states in ultrathin Bi films: Angle-resolved photoemission spectroscopy and first-principles calculations study / T. Hirahara, T. Nagao, I. Matsuda, G. Bihlmayer, E.V. Chulkov, Yu.M. Koroteev, and S. Hasegawa // Physical Review B. – 2007. – V.75. – P.035422.

122. Hirahara, T. Direct observation of spin splitting in bismuth surface states /
T. Hirahara, K. Miyamoto, I. Matsuda, T. Kadono, A. Kimura, T. Nagao, G. Bihlmayer,
E.V. Chulkov, S. Qiao, K. Shimado, H. Namatame, M. Taniguchi, and S. Hasegawa //
Physical Review B. – 2007. – V.76. – P.153305.

123. Hirohata, A. Review on spintronics: Principles and device applications /
A. Hirohata, K. Yamada, Y. Nakatani, I.-L. Prejbeanu, B. Diény, P. Pirro,
B. Hillebrands // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2020. – V.509. –
P.166711.

124. Hsu, C.-H. Nuclear-spin-induced localization of the edge states in twodimensional topological insulators / C.-H. Hsu, P. Stano, J. Klinovaja, and D. Loss // Physical Review B. – 2017. – V.96. – P.081405.

125. Hsu, C.-H. Effects of nuclear spins on the transport properties of the edge of two-dimensional topological insulators / C.-H. Hsu, P. Stano, J. Klinovaja, and D. Loss // Physical Review B. – 2018. – V.97. – P.125432.

126. Ivakhnenko, O.V. Nonadiabatic Landau-Zener-Stückelberg-Majorana transitions, dynamics and interference / O.V. Ivakhnenko, S.N. Shevchenko, F. Nori // Physics Reports. – 2023. – V.995. – P.1.

127. Ivchenko, E.L. Superlattices and Other Heterostructures / E.L. Ivchenko, G.E. Pikus // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 1997. – 382 P.

128. Ivchenko, E.L. Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures /
E.L. Ivchenko // Alpha Science Int., Harrow, UK. – 2005. – 350 P.

129. Ikezawa, M. Submillisecond electron spin relaxation in InP quantum dots /
M. Ikezawa, B. Pal, Y. Masumoto, I.V. Ignatiev, S.Yu. Verbin, I.Ya. Gerlovin //
Physical Review B. - 2005. - V.72. - P.153302

130. Kane, C.L. Z₂ Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect /
C.L. Kane and E.J. Mele // Physical Review Letters. – 2005(a). – V.95. – P.146802.

131. Kane, C.L. Quantum Spin Hall Effect in Graphene / C.L. Kane and E.J. Mele// Physical Review Letters. – 2005(b). – V.95. – P.226801.

132. Kato, Y.K. Observation of the Spin Hall Effects in Semiconductors /
Y.K. Kato, R.C. Myers, A.C. Gossard, D.D. Awschalom // Science. – 2004. – V.306. –
P.1910.

133. Katsnelson, M.I. Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene / M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, and A.K. Geim // Nature Physics. – 2006. – V.2. – P.620.

134. Khaetskii, A.V. Spin relaxation in semiconductor quantum dots / A.V. Khaetskii and Yu.V. Nazarov // Physical Review B. – 2000. – V.61. – P.12639.

135. Khaetskii, A.V. Spin-flip transitions between Zeeman sublevels in semiconductor quantum dots / A.V. Khaetskii and Yu.V. Nazarov // Physical Review B. - 2001. - V.64. - P.125316.

136. Khodas, M. Spin Polarization of Electrons by Noнмagnetic Heterostructures: The Basics of Spin Optics / M. Khodas, A. Shekhter, and A.M. Finkel'stein // Physical Review Letters. – 2004. – V.92. – P.086602.

137. Khomitsky, D.V. Scattering on the lateral one-dimensional superlattice with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2007. – V.76. – P.033404.

138. Khomitsky, D.V. Manipulating the spin texture in a spin-orbit superlattice by terahertz radiation / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2008. – V.77. – P.113313.

139. Khomitsky, D.V. Electric-field induced spin textures in a superlattice with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2009(a). – V.79. – P.205401.

140. Khomitsky, D.V. Nonlinear spin-charge dynamics in a driven double quantum dot / D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2009(b) – V.79. – P.245321.

141. Khomitsky, D.V. Pulse-pumped double quantum dot with spin-orbit coupling
/ D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Europhysics Letters. – 2010. – V.90. – P.27010.

142. Khomitsky, D.V. Pumped double quantum dot with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Nanoscale Research Letters. – 2011. – V.6. – P.212.

143. Khomitsky, D.V. Spin dynamics in a strongly driven system: Very slow Rabi oscillations / D.V. Khomitsky, L.V. Gulyaev, and E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2012. – V.85. – P.125312.

144. Khomitsky, D.V. Quantum states and linear response in dc and electromagnetic fields for the charge current and spin polarization of electrons at the Bi/Si interface with the giant spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2012. – Т.141, вып.5. – С.848.

145. Khomitsky, D.V. Spin chaos manifestation in a driven quantum billiard with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, A.I. Malyshev, E.Ya. Sherman, and M. Di Ventra // Physical Review B. – 2013 – V.88. – P.195407.

146. Khomitsky, D.V. Edge states and topological properties of electrons on the bismuth on silicon surface with giant spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, A.A. Chubanov // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – T.145, вып.3. – C.525.

147. Khomitsky, D.V. Regular and irregular dynamics of spin-polarized wavepackets in a mesoscopic quantum dot at the edge of topological insulator / D.V. Khomitsky, A.A. Chubanov, A.A. Konakov // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2016. – Т.150, вып.6(12). – С.1200.

148. Khomitsky, D.V. Electric dipole spin resonance at shallow donors in quantum wires / D.V. Khomitsky, E.A. Lavrukhina, and E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2019. – V.99. – P.014308.

149. Khomitsky, D.V. Spin Rotation by Resonant Electric Field in Few-Level Quantum Dots: Floquet Dynamics and Tunneling / D.V. Khomitsky, E.A. Lavrukhina, and E.Ya. Sherman // Physical Review Applied. – 2020. – V.14. – P.014090.

150. Khomitsky, D.V. Connecting the numerical and analytical ionization times for quantum dots in semiconductor wires driven by alternating field / D.V. Khomitsky // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – V.1967. – P.012197.

151. Khomitsky, D.V. Quasistationary states in a quantum dot formed at the edge of topological insulator by magnetic barriers with finite transparency / D.V. Khomitsky and E.A. Lavrukhina // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V.2103. – P.012201.

152. Khomitsky, D.V. Single-spin Landau-Zener-Stückelberg-Majorana interferometry of Zeeman-split states with strong spin-orbit interaction in a double quantum dot / D.V. Khomitsky and S.A. Studenikin // Physical Review B. – 2022. – V.106. – P.195414.

153. Khomitsky, D.V. Formation of bound states from the edge states of 2D topological insulator by macroscopic magnetic barriers / D.V. Khomitsky, A.A. Konakov and E.A. Lavrukhina // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2022. – V.34. – P.405302.

154. Khomitsky, D.V. Controllable single-spin evolution at subharmonics of electric dipole spin resonance enhanced by four-level Landau-Zener-Stückelberg-Majorana interference / D.V. Khomitsky, M.V. Bastrakova, V.O. Munyaev, N.A. Zaprudnov, and S.A. Studenikin // Physical Review B. – 2023 – V.108. – P.205404.

155. Khurgin, J.B. Quantum interference control of electrical currents and THz radiation in optically excited zinc-blende quantum wells / J.B. Khurgin // Physical Review B. – 2006. – V.73. – P.033317.

156. Kimme, L. Backscattering in helical edge states from a magnetic impurity and Rashba disorder / L. Kimme, B. Rosenow, and A. Brataas // Physical Review B. – 2016.
– V.93. – P.081301(R).

157. Kleinert, P. Spin accumulation in lateral semiconductor superlattices induced by a constant electric field / P. Kleinert, V.V. Bryksin, and O. Bleibaum // Physical Review B. – 2005. – V.72. – P.195311.

158. Kłos, J. Conditions of coexistence of Tamm and Shockley states in a superlattice with a periodic surface / J. Kłos and H. Puszkarski // Physical Review B. – 2003. – V.68. – P.045316.

159. Kong, B.D. Unusual magnetoresistance in a topological insulator with a single ferromagnetic barrier / B.D. Kong, Y.G. Semenov, C.M. Krowne, and K.W. Kim // Applied Physics Letters. – 2011. – V.98. – P.243112.

160. Kononov, A. Evidence on the macroscopic length scale spin coherence for the edge currents in a narrow HgTe quantum well / A. Kononov, S.V. Egorov, Z.D. Kvon, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretsky, E.V. Devyatov // Письма в ЖЭТФ. – 2015. – Т.101, вып.11-12. – С.913.

161. Koppens, F.H.L. Driven coherent oscillations of a single electron spin in a quantum dot / F.H.L. Koppens, C. Buizert, K.J. Tielrooij, I.T. Vink, K.C. Nowack, T. Meunier, L.P. Kouwenhoven and L.M.K. Vandersypen // Nature. – 2006. – V.442. – P.766.

162. Korenev, V.L. Dynamic spin polarization by orientation-dependent separation in a ferromagnet-semiconductor hybrid / V.L. Korenev, I.A. Akimov, S.V. Zaitsev, V.F. Sapega, L. Langer, D.R. Yakovlev, Yu.A. Danilov and M. Bayer // Nature Communications. – 2012. – V.3. – P.959.

163. Korenev, V.L. Long-range p-d exchange interaction in a ferromagnet-semiconductor hybrid structure / V.L. Korenev, M. Salewski, I.A. Akimov, V.F. Sapega, L. Langer, I.V. Kalitukha, J. Debus, R.I. Dzhioev, D.R. Yakovlev, D. Müller, C. Schröder, H. Hövel, G. Karczewski, M. Wiater, T. Wojtowicz, Yu.G. Kusraev, and M. Bayer // Nature Physics. – 2016. – V.12. – P.85.

164. Kozlov, D.A. Transport Properties of a 3D Topological Insulator Based on a Strained High Mobility HgTe Film / D.A. Kozlov, Z.D. Kvon, E.B. Olshanetsky, N.N. Mikhailov, and S.A. Dvoretsky // Physical Review Letters. – 2014. – V.112. – P.196801.

165. Krueckl, V. Switching spin and charge between edge states in topological insulator constrictions / V. Krueckl and K. Richter // Physical Review Letters. – 2011. – V.107. – P.086803.

166. Kundu, A. Energy spectrum and broken spin-surface locking in topological insulator quantum dots / A. Kundu, A. Zazunov, A.L. Yeyati, T. Martin, and R. Egger // Physical Review B. – 2011. – V.83. – P.125429.

167. Kurilovich, P.D. Indirect exchange interaction between magnetic impurities in the two-dimensional topological insulator based on CdTe/HgTe/CdTe quantum wells / P.D. Kurilovich, V.D. Kurilovich, and I.S. Burmistrov // Physical Review B. – 2016. – V.94. – P.155408.

168. Kurilovich, P.D. Helical edge transport in the presence of a magnetic impurity
/ P.D. Kurilovich, V.D. Kurilovich, I.S. Burmistrov, M. Goldstein // JETP Letters. –
2017. – V.106. – P.593.

169. König, M. The Quantum Spin Hall Effect: Theory and Experiment / M. König, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, T.L. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi and S.-C. Zhang. // Journal of Physical Society of Japan. – 2008. – V.77. – P.031007.

170. Lafuente-Sampietro, A. Resonant photoluminescence and dynamics of a hybrid Mn-hole spin in a positively charged magnetic quantum dot / A. Lafuente-Sampietro, H. Boukari, and L. Besombes // Physical Review B. – 2017. – V.95. – P.245308.

171. Leontiadou, M.A. Experimental determination of the Rashba coefficient in InSb/InAlSb quantum wells at zero magnetic field and elevated temperatures / M.A. Leontiadou, K.L. Litvinenko, A.M. Gilbertson, C.R. Pidgeon, W.R. Branford, L.F. Cohen, M. Fearn, T. Ashley, M.T. Emeny, B.N. Murdin, and S.K. Clowes // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2011. – V.23. – P.035801.

172. Li, R. A spin dephasing mechanism mediated by the interplay between the spin-orbit coupling and the asymmetrical confining potential in semiconductor quantum dot / R. Li // Journal of Physics: Condensed Matter. -2018. - V.30. - P.395304.

173. Li, Y-C. Qubit gates with simultaneous transport in double quantum dots / Y.-C. Li, X. Chen, J.G. Muga and E.Ya. Sherman // New Journal of Physics. – 2018. – V.20. – P.113029.

174. Li, R. Charge noise induced spin dephasing in a nanowire double quantum dot with spin-orbit coupling / R. Li // Journal of Physics: Condensed Matter. -2020. - V.32. - P.025305.

175. Li, X. Electric field tuning spin splitting in topological insulator quantum dots doped with a single magnetic ion / X. Li, Z. Wu and W. Lou // Scientific Reports. - 2019. - V.9. - P.9080.

176. Linder, J. Anomalous Finite Size Effect on Surface States in the Topological Insulator Bi₂Se₃ // J. Linder, T. Yokoyama, and A. Sudbø // Physical Review B. – 2009.
– V.80. – P.205401.

177. Linpeng, X. Longitudinal spin-relaxation of donor-bound electrons in direct band-gap semiconductors / X. Linpeng, T. Karin, M.V. Durnev, R. Barbour, M.M. Glazov, E.Ya. Sherman, S. Watkins, S. Seto, and K.-M. Fu // Physical Review B. – 2016. – V.94. – P.125401.

178. Linpeng, X. Coherence properties of shallow donor qubits in ZnO /
X. Linpeng, M.L.K. Viitaniemi, A. Vishnuradhan, Y. Kozuka, C. Johnson,
M. Kawasaki, and K.-M. Fu // Physical Review Applied. – 2018. – V.10. – P.046061.

179. Liu, Q. Magnetic impurities on the surface of a topological insulator / Q. Liu, C.-X. Liu, C. Xu, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang // Physical Review Letters. – 2009. – V.102. – P.156603.

180. Liu, C.-X. Model Hamiltonian for topological insulators / C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang // Physical Review B. – 2010. – V.82. – P.045122.

181. Liu, Z.-Q. Magnetically Controlled Electronic Transport Properties of a Ferromagnetic Junction on the Surface of a Topological Insulator / Z.-Q. Liu, R.-Q. Wang, M.-X. Deng, and L.-B. Hu // Communications in Theoretical Physics. – 2015. – V.63. – P.777.

182. Lu, H-.Z. Massive Dirac fermions and spin physics in an ultrathin film of topological insulator / H.-Z. Lu, W.-Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S.-Q. Shen // Physical Review B. – 2010. – V.81. – P.115407.

183. Luo, W. Massive Dirac surface states in topological insulator/magnetic insulator heterostructures / W. Luo and X.-L. Qi // Physical Review B. – 2013. – V.87. – P.085431.

184. Maekawa, S. Concepts in spin electronics / Ed. by S. Maekawa // New York: Oxford University Press. – 2006. – 398 P.

185. Maksimova, G.M. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap / G.M. Maksimova, E.S. Azarova, A.V. Telezhnikov, and V.A. Burdov // Physical Review B. – 2012. – V.86. – P.205422.

186. Mal'shukov, A.G. Edge bands and vertical transport in topological insulator/magnetic insulator heterostructures / A.G. Mal'shukov // Physical Review B. – 2014. – V.90. – P.045311.

187. Marton, V. Coherence Characteristics of a GaAs Single Heavy-Hole Spin Qubit Using a Modified Single-Shot Latching Readout Technique / V. Marton, A. Sachrajda, M. Korkusinski, A. Bogan and S. Studenikin // Nanomaterials. – 2023. – V.13. – P.950.

188. Mihalyuk, A.N. Promoting spin-polarized states in Bi/Si(111) interface mediated bu Ba intercalation for advanced spintronics applications / A.N. Mihalyuk, Yu.E. Vekovshinin, A.Y. Tupchaya, L.V. Bondarenko, D.V. Gruznev, S.V. Eremeev, A.V. Zotov, A.A. Saranin // Scripta Materialia. – 2024. – V.239. – P.115807.

189. Miller, J.B. Gate-Controlled Spin-Orbit Quantum Interference Effects in Lateral Transport / J.B. Miller, D.M. Zumbül, C.M. Marcus, Y.B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, and A.C. Gossard // Physical Review Letters. – 2003. – V.90. – P.076807.

190. Milosevic, N. Semiclassical Dirac Theory of Tunnel Ionization / N. Milosevic, V.P. Krainov, and T. Brabec // Physical Review Letters. – 2002. – V.89. – P.193001.

191. Milton Pereira, Jr., J. Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells / J. Milton Pereira, Jr., V. Milnar, F.M. Peeters,
P. Vasilopoulos // Physical Review B. - 2006. - V.74. - P.045424.

192. Mireles, F. Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires / F. Mireles and G. Kirczenow // Physical Review B. – 2001.
– V.64. – P.024426.

193. Moraes, F.C.D. Acceleration of the precession frequency for opticallyoriented electron spins in ferromagnetic/semiconductor hybrids / F.C.D. Moraes, S. Ullah, M.A.G. Balanta, F. Ikawa, Y.A. Danilov, M.V. Dorokhin, O.V. Vikhrova and F.G.G. Hernandez // Scientific Reports. – 2019. – V.9. – P.7294.

194. Moroz, A.V. Effect of the spin-orbit interaction on the band structure and conductance of quasi-one-dimensional systems / A.V. Moroz and C.H.W. Barnes // Physical Review B. – 1999. – V.60. – P.14272.

195. Munyaev, V.O. Control of spectroscopic features of multiphoton transitions in two coupled qubits by driving fields / V.O. Munyaev and M.V. Bastrakova // Physical Review A. – 2021. – V.104. – P.012613.

196. Murakami, S. Quantum Spin Hall Effect and Enhanced Magnetic Response by Spin-Orbit Coupling / S. Murakami // Physical Review Letters. – 2006. – V.97. – P.236805.

197. Myers, R.C. Zero-field optical manipulation of magnetic ions in semiconductors / R.C. Myers, M.H. Mikkelsen, J.-M. Tang, A.C. Gossard, M.E. Flatté, and D.D. Awschalom // Nature Materials. – 2008. – V.7. – P.203.

198. Nadj-Perge, S. Spin-orbit qubit in a semiconductor nanowire / S. Nadj-Perge, S.M. Frolov, E.P.A.M. Bakkers and L.P. Kouwenhoven // Nature. – 2010. – V.468. – P.1084.

199. Nadj-Perge, S. Spectroscopy of Spin-Orbit Quantum Bits in Indium Antimonide Nanowires / S. Nadj-Perge, V.S. Pribiag, J.W.G. van den Berg, K. Zuo, S.R. Plissard, E.P.A.M. Bakkers, S.M. Frolov, and L.P. Kouwenhoven // Physical Review Letters. – 2012. – V.108. – P.166801.

200. Nagaoka, K. Observation of lateral band-bending in the edge vicinity of atomically-thin Bi insulating film formed on Si(111) surface / K. Nagaoka, T. Uchihashi, T. Nakayama // Surface Science. – 2016. – V.644. – P.41.

201. Nowack, K.C. Coherent Control of a Single Electron Spin with Electric Fields / K.C. Nowack, F.H.L. Koppens, Yu.V. Nazarov, L.M.K. Vandersypen // Science. – 2007. – V.318. – P.1430.

202. Ohno, H. Observation of "Tamm States" in Superlattices / H. Ohno, E.E. Mendez, J.A. Brum, J.M. Hong, F. Agulló-Rueda, L.L. Chang, and L. Esaki // Physical Review Letters. – 1990. – V.64. – P.2555.

203. Oiwa, A. Effect of Optical Spin Injection on Ferromagnetically Coupled Mn Spins in the III-V Magnetic Alloy Semiconductor (Ga,Mn)As / A. Oiwa, Y. Mitsumori, R. Moriya, T. Słupinski, and H. Munekata // Physical Review Letters. – 2002. – V.88. – P.137202.

204. Padawer-Blatt, A. Characterization of dot-specific and tunable effective g factors in a GaAs/AlGaAs double quantum dot single-hole device / A. Padawer-Blatt, J. Dulcatel, M. Korkusinski, A. Bogan, L. Gaudreau, P. Zawadzki, D.G. Austing, A.S. Sachrajda, S. Studenikin, L. Tracy, J. Reno and T. Hargett // Physical Review B. – 2022. – V.105. – P.195305.

205. Palpacelli, S. Klein Tunneling in the presence of random impurities / S. Palpacelli, M. Nendoza, H.J. Herrmann, and S. Succi // International Journal of Modern Physics C. – 2012. – V.23. – P.1250080.

206. Pershin, Y.V. Long-lived spin coherence states in semiconductor heterostructures / Y.V. Pershin // Physical Review B. – 2005. – V.71. – P.155317.

207. Petta, J.R. Coherent Manipulation of Coupled Electron Spins in Semiconductor Quantum Dots. / J.R. Petta, A.C. Johnson, J.M. Taylor, E.A. Laird, A. Yacoby, M.D. Lukin, C.M. Marcus, M.P. Hanson, A.C. Gossard // Science. – 2005. – V.309. – P.2180.

208. Pribiag, V.S. Electrical control over single hole spins in nanowire quantum dots / V.S. Pribiag, S. Nadj-Perge, S.M. Frolov, J.W.G. van den Berg, I. van Weperen,

S.R. Plissard, E.P.A.M. Bakkers and L.P. Kowenhoven // Nature Nanotechnology. – 2013. – V.8. – P.170.

209. Qi, X.-L. Topological insulators and superconductors / X.-L. Qi, S.-C. Zhang // Reviews of Modern Physics. – 2011. – V.83. – P.1057.

210. Qi, X.-L. Massive Dirac surface states in topological insulator/magnetic insulator heterostructures / W. Luo and X.-L. Qi // Physical Review B. – 2013. – V.87. – P.085431.

211. Radescu, S. Soft-phonon instability in zincblende HgSe and HgTe under moderate pressure: *Ab initio* pseudopotential calculations / S. Radescu, A. Mujica, and R.J. Needs // Physical Review B. – 2003. – V.80. – P.144110.

212. Rashba, E.I. Electric-Dipole Spin Resonances. Chapter 4 in Landau Level Spectroscopy (Ed. by G. Landwehr and E.I. Rashba) / E.I. Rashba and V.I. Sheka // Elsevier Science Publishers B.V. – 1991. – PP. 133-202.

213. Rashba, E.I. Orbital Mechanisms of Electron-Spin Manipulation by an Electric Field / E.I. Rashba and Al.L. Efros // Physical Review Letters. – 2003. – V.91. – P.126405.

214. Rashba, E.I. Mechanism of half-frequency electric dipole spin resonance in double quantum dots: Effect of nonlinear charge dynamics inside the singlet manifold / E.I. Rashba // Physical Review B. – 2011. – V.84. – P.421305R.

215. Reichl, L.E. The Transition to Chaos. Conservative Classical Systems and Quantum Manifestations. / L.E. Reichl // Springer-Verlag New York. – 2004. – 675 P.

216. Repin, E.V. Surface states in a 3D topological insulator: the role of hexagonal warping and curvature / E.V. Repin, I.S. Burmistrov // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т.148. – вып.3(9). – С.584.

217. Reis, F. Bismuthene on a SiC substrate: A candidate for a high-temperature quantum spin Hall material / F. Reis, G. Li, L. Drudy, M. Bauernfeind, S. Glass, W. Hanke, R. Thomale, J. Schäfer, R. Claessen // Science. – 2017. – V.357. – P.287.

218. Ricco, B. Physics of resonant tunneling. The one-dimensional double-barrier case / B. Ricco and M.Ya. Azbel // Physical Review B. – 1984. – V.29. – P.1970.

219. Romera, E. Revivals, classical periodicity, and zitterbewegung of electron currents in monolayer graphene / E. Romera and F. de los Santos // Physical Review B. -2009. - V.80. - P.165416.

220. Romhányi, J. Subharmonic transitions and Bloch-Siegert shift in electrically driven spin resonance / J. Romhányi, G. Burkard, and A. Pályi // Physical Review B. – 2015. – V.92. – P.054422.

221. Ru-keng, S. Exact solutions of the Dirac equation with a linear scalar confining potential in a uniform electric field / S. Ru-keng and Z. Yuhong // Journal of Physics A: Mathematics and General. – 1984. – V.17. – P.851.

222. Räsänen, E. Optimal laser-control of double quantum dots / E. Räsänen, A. Castro, J. Werschnik, A. Rubio, and E.K.U. Gross // Physical Review B. – 2008. – V.77. – P.085324.

223. Rössler, U. Optical response and spin relaxation in semiconductor systems under excitation with arbitrary polarization / U. Rössler // Physica Status Solidi B. – 2002. – V.234. – P.385.

224. Sablikov, V.A. Conductance suppression by понмаgnetic point defects in helical edge channels of two-dimensional topological insulators / V.A. Sablikov and A.A. Sukhanov // Physical Review B. – 2021. – V.103. – P.155424.

225. Saha, K. Phonon-induced topological insulation / K. Saha and I. Garate // Physical Review B. – 2014. – V.89. – P.205103.

226. Saïdi, I. Band parameters of GaAs, InAs, InP, and InSb in the 40-band k·p model / I. Saïdi, S. Ben Radhia, and K. Boujdaria // Journal of Applied Physics. – 2010. – V.107. – P.043701.

227. Satanin, A.M. Amplitude spectroscopy of two coupled qubits / A.M. Satanin, M.V. Denisenko, S. Ashhab, and F. Nori // Physical Review B. – 2012. – V.85. – P.184524.

228. Satanin, A.M. Amplitude and phase effects in Josephson qubits driven by a biharmonic electromagnetic field / A.M. Satanin, M.V. Denisenko, A.I. Gelman, and F. Nori // Physical Review B. – 2014. – V.90. – P.104516.

229. Saxena, R. Electronic confinement of surface states in a topological insulator nanowire / R. Saxena, E. Grosfeld, S. E. de Graf, T. Lindstrom, F. Lombardi, O. Deb, and E. Ginossar // Physical Review B. – 2022. – V.106. – P.035407.

230. Scarlino, P. Second harmonic coherent driving of a spin qubit in a Si/SiGe quantum dot / P. Scarlino, E. Kawakami, D.R. Ward, D.E. Savage, M.G. Lagally, M. Friesen, S.N. Koppersmith, M.A. Eriksson, and L.M.K. Vandersypen // Physical Review Letters. – 2015. – V.115. – P.106802.

231. Scharf, B. Tunneling Planar Hall Effect in Topological Insulators: Spin Valves and Amplifiers / B. Scharf, A. Matos-Abiague, J.E. Han, E.M. Hankiewicz, and I. Žutić // Physical Review Letters. – 2016. – V.117. – P.166806.

232. Scholz, A. Interplay between spin-orbit interactions and a time-dependent electromagnetic field in monolayer graphene / A. Scholz, A. López, and J. Schliemann // Physical Review B. – 2013. – V.88. – P.045118.

233. Shamirzaev, T.S. Dynamics of exciton recombination in strong magnetic fields in ultrfathin GaAs/AlAs quantum wells with indirect band gap and type-II band aligнмent / T.S. Shamirzaev, J. Debus, D.R. Yakovlev, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko, and M. Bayer // Physical Review B. – 2016. – V.94. – P.045411.

234. Shamirzaev, T.S. Spin dynamics and magnetic-field-induced polarization of excitons in ultrathin GaAs/AlAs quantum wells with indirect band gap and type-II band aligнмent / T.S. Shamirzaev, J. Rautert, D.R. Yakovlev, J. Debus, A.Yu. Gornov, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko, and M. Bayer // Physical Review B. – 2017. – V.96. – P.035302.

235. Shekhter, A. Diffuse emission in the presence of an inhomogeneous spin-orbit interaction for the purpose of spin filtration / A. Shekhter, M. Khodas, and A.M. Finkel'stein // Physical Review B. -2005. - V.71. - P.125114.

236. Shen, S.-Q. Topological Insulators. Dirac Equation in Condensed Matters / S.-Q. Shen // Springer-Verlag Berlin Heidelberg. – 2012. – 225 P.

237. Shen, D.N. A topological characterization of delocalization in a spin-orbit coupling system / D.N. Sheng and Z.Y. Weng // Physical Review B. – 1996. – V.54. – P.R11070.

238. Sherman, E.Ya. Spin Tunneling and Manipulation in Nanostructures / E.Ya. Sherman, Yue Ban, L.V. Gulyaev, D.V. Khomitsky // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2012. – V.12. – P.7535.

239. Sherman, E.Ya. Spin Dynamics in One-dimensional Semiconductors: Unusual Relaxation and Resonances / E.Ya. Sherman, D.V. Khomitsky, V.K. Dugaev // Chapter 7 in "Advances in Semiconductor Research. Physics of Nanosystems, Spintronic and Technological Applications", Ed. by D. Persano Adorno and S. Pokutnyi, Nova Science Publishers, Inc., New York. – 2015. – 307 P.

240. Shevchenko, S.N. Landau-Zener-Stückelberg interferometry / S.N. Shevchenko, S. Ashhab, F. Nori // Physics Reports. – 2010. – V.492. – P.1.

241. Shi, J. Proper Definition of Spin Current in Spin-Orbit Coupled Systems / J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, and Q. Niu // Physical Review Letters. – 2006. – V.96. – P.076604.

242. Singh, A. Up to 70 THz bandwidth from an implanted Ge photoconductive antenna excited by a femtosecond Er: fibre laser / A. Singh, A. Pashkin, S. Winner, M. Welsch, C. Beckh, P. Sulzer, A. Leitenstorfer, M. Helm and H. Schneider // Light: Science and Applications. – 2020. – V.9. – P.30.

243. Sokolovski, D. Measurement of non-commuting spin components using spinorbit interaction / D. Sokolovski and E.Ya. Sherman // Physical Review A. – 2011. – V.84. – P.030101(R).

244. Sokolovski, D. Zeno effect and ergodicity in finite-time quantum measurements / D. Sokolovski // Physical Review A. – 2011. – V.84. – P.062117.

245. Solenov, D.S. Nonlinear suppression of relaxation in dynamic localization phenomenon in a double quantum dot / D.S. Solenov and V.A. Burdov // Physical Review B. – 2005. – V.72. – P.085347.

246. Stehlik, J. Extreme Harmonic Generation in Electrically Driven Spin Resonance / J. Stehlik, M.D. Schroer, M.Z. Maialle, M.H. Degani, and J.R. Petta // Physical Review Letters. – 2014. – V.112. – P.227601.

247. Stepina, N.P. Indication for an anomalous magnetoresistance mechanism in (Bi, Sb)₂(Te, Se)₃ three-dimensional topological insulator thin films / N.P. Stepina,

A.O. Bazhenov, A.V. Shumilin, A.Yu. Kuntsevich, V.V. Kirienko, E.S. Zhdanov,
D.V. Ishchenko, and O.E. Tereshchenko // Physical Reviw B. - 2023. - V.108. P.115401.

248. Streed, E.W. Continuous and Pulsed Quantum Zeno Effect / E.W. Streed, J. Mun, M. Boyd, G.K. Campbell, P. Medley, W. Ketterle, D.E. Pritchard // Physical Review Letters. – 2006. – V.97. – P.260402.

249. Studenikin, S. Electrically tunable effective g-factor of a single hole in a lateral GaAs/AlGaAs quantum dot / S. Studenikin, M. Korkusinski, M. Takahashi, J. Ducatel, A. Padawer-Blatt, A. Bogan, D. Guy Austig, L. Gaudreau, P. Zawadzki, A. Sachrajda, Y. Hirayama, L. Tracy, J. Reno and T. Hargett // Communications Physics. – 2019.– V.2. – P.159.

250. Studenikin, S. Single-hole physics in GaAs/AlGaAs double quantum dot system with strong spin-orbit interaction / S. Studenikin, M. Korkusinski, A. Bogan, L. Gaudreau, D. Guy Austing, A.S. Sachrajda, L. Tracy, J. Reno and T. Hargett // Semiconductor Science and Technology. – 2021. – V.36. – P.053001.

251. Sy, H.K. Internal Tamm states in finite and infinite superlattices / H.K. Sy and T.C. Chua // Physical Review B. – 1993. – V.48. – P.7930.

252. Tarasenko, S.A. Spin orientation of a two-dimensional electron gas by a high-frequency electric field / S.A. Tarasenko // Physical Review B. – 2006. – V.73. – P.115317.

253. Timm, C. Transport through a quantum spin Hall quantum dot / C. Timm // Physical Review B. – 2012. – V.86. – P.155456.

254. Traverso Ziani, N. From fractional solitons to Majorana fermions in a paradigmatic model of topological superconductivity / N. Traverso Ziani, C. Fleckenstein, L. Vigliotti, B. Trauzettel, and M. Sassetti // Physical Review B. – 2020. – V.101. – P.195303.

255. Vurgaftman, I. Kinetic spin confinement by lateral modulation of the Rashba or Dresselhaus coefficient / I. Vurgaftman and J.R. Meyer // Physical Review B. – 2004.
– V.70. – P.205319.

256. Wang, X.F. Spin-current modulation and square-wave transmission through periodically stubbed electron waveguides / X.F. Wang, P. Vasilopoulos, and F.M. Peeters // Physical Review B. – 2002. – V.65. – P.165217.

257. Wang, X.F. Spin transport of electrons through quantum wires with a spatially modulated Rashba spin-orbit interaction / X.F. Wang // Physical Review B. – 2004. – V.69. – P.035302.

258. Wang, J. Intrinsic oscillation of spin accumulation induced by Rashba spinorbital interaction / J. Wang, K.S. Chan, and D.Y. Xing // Physical Review B. – 2006. – V.73. – P.033316.

259. Wang, Y.-X. High Chern number phase in topological insulator multilayer structures / Y.-X. Wang and F. Li // Physical Review B. – 2021. – V.104. – P.035202.

260. Werschnik. J. Quantum Optimal Control Theory / J. Werschnik and E.K.U. Gross // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2007. – V.40. – P.R175.

261. Winkler, R. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems / R. Winkler // Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Germany. – 2003. – 224 P.

262. Wójcik, P. Tuning Rashba spin-orbit coupling in homogeneous semiconductor nanowires / P. Wójcik, A. Bertoni, and G. Goldoni // Physical Review B. – 2018. – V.97. – P.165401.

263. Wolski, S. Random spin-orbit gates in the system of a topological insulator and a quantum dot / S. Wolski, M. Inglot, C. Jasiukiewicz, K.A. Kouzakov, T. Masłowski, T. Szczepański, S. Stagraczyński, R. Stagraczyński, V.K. Dugaev, and L. Chotorlishvili // Physical Review B. – 2022. – V.106. – P.224418.

264. Wozny, S. Gap formation in helical edge states with magnetic impurities / S. Wozny, K. Vyborny, W. Belzig, and S.I. Erlingsson // Physical Review B. – 2018. – V.98. – P.165423.

265. Wu, Z. Electron tunneling through double magnetic barriers on the surface of a topological insulator / Z. Wu, F.M. Peeters, and K. Chang // Physical Review B. - 2010. - V.82 - P.115211.

266. Wu, Z. Spin-related tunneling through a nanostructured electric-magnetic barrier on the surface of a topological insulator / Z. Wu and J. Li // Nanoscale Research letters. -2012. - V.7. - P.90.

267. Xie, Y. Spintronic signatures of Klein tunneling in topological insulators / Y. Xie, Y. Tan, and A.W. Ghosh // Physical Review B. – 2017. – V.96. – P.205151.

268. Yesilyurt, C. Klein tunneling in Weyl semimetals under the influence of magnetic field / C. Yesilyurt, S.G. Tan, G. Liang, and M.B.A. Jalil // Scientific Reports. – 2016. – V.6. – P.38862.

269. Zainagutdinov, A.R. Aharonov-Bohm nanoring with periodically modulated Rashba interaction: Energy spectrum and persistent currents / A.R. Zainagutdinov, A.V. Telezhnikov, G.M. Maksimova // Physics Letters A. – 2022. – V.430. – P.127972.

270. Zaitsev, S.V. Circularly polarized electroluminescence in LED heterostructures with InGaAs/GaAs quantum well and Mn δ-layer / S.V. Zaitsev, V.D. Kulakovskii, M.V. Dorokhin, Yu.A. Danilov, P.B. Demina, M.V. Sapozhnikov, O.V. Vikhrova, B.N. Zvonkov // Physica E. – 2009. – V.41., issue 4. – P.652.

271. Zhang, J.P. Electron transport with tunable ferromagnetic barriers on the surface of topological insulators / J.P. Zhang and J.H. Yuan // European Physical Journal B. – 2013. – V.85. – P.100.

272. Zhang, L. Dynamics of dissipative Landau-Zener transitions in an anisotropic three-level system / L. Zhang, L. Wang, M. Gelin, Y. Zhao // The Journal of Chemical Physics. – 2023. – V.158. – P.204115.

273. Zhao, H. Injection of ballistic pure spin currents in semiconductors by a single-color linearly polarized beam / H. Zhao, X. Pan, A.L. Smirl, R.D.R. Bhat, A. Najmaie, J.E. Sipe, and H.M. van Driel // Physical Review B. – 2005. – V.72. – P.201302(R).

274. Zhou, B. Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System / B. Zhou, H.-Z. Lu, R.-L. Chu, S.-Q. Shen, and Q. Niu // Physical Review Letters. – 2008. – V.101. – P.246807.

275. Zhou, Y. Energy shifty and subharmonics induced by nonlinearity in a quantum dot system / Y. Zhou, G. Cao, H.-O. Li, and G.-P. Guo // Chinese Physics B. – 2023. – V.32. – P.060303.

276. Zhou, Y. Full tunability and quantum coherent dynamics of a driven multilevel system / Y. Zhou, S. Gu, K. Wang, G. Cao, X. Hu, M. Gong, H.-O. Li, and G.-P. Guo // Physical Review Applied. – 2023. – V.19. 0 P.044053.

277. Žutić, I. Spintronics: Fundamentals and Applications / I. Žutić, J. Fabian,
S. Das Sarma // Reviews of Modern Physics - 2004. - V.76. - P.323.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

A1. Demikhovskii, V.Ya. Spin-orbit lateral superlattices: energy bands and spin polarization in 2DEG / V.Ya. Demikhovskii, D.V. Khomitsky // Письма в ЖЭТФ. – 2006 – Т.83, вып.8 – С.399.

А2. Демиховский, В.Я. Периодические структуры со спин-орбитальным взаимодействием / В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, А.А. Перов // Физика низких температур. – 2007. – Т.33, №2/3 – С.165.

A3. Khomitsky, D.V. Scattering on the lateral one-dimensional superlattice with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2007. – V.76. – P.033404.

A4. Khomitsky, D.V. Manipulating the spin texture in a spin-orbit superlattice by terahertz radiation / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2008. – V.77. – P.113313.

A5. Khomitsky, D.V. Electric-field induced spin textures in a superlattice with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // Physical Review B. – 2009. – V.79. – P.205401.

Аб. Хомицкий, Д.В. Немагнитная спинтроника: моделирование спиновых текстур в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием / Д.В. Хомицкий // Наноструктуры, математическая физика и моделирование. – 2009. – Т.1, №1. – С.83.

A7. Khomitsky, D.V. Nonlinear spin-charge dynamics in a driven double quantum dot / D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2009 – V.79. – P.245321.

A8. Khomitsky, D.V. Pulse-pumped double quantum dot with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Europhysics Letters. – 2010. – V.90. – P.27010.

A9. Khomitsky, D.V. Pumped double quantum dot with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman // Nanoscale Research Letters. – 2011. – V.6. – P.212.

A10. Sherman, E.Ya. Spin Tunneling and Manipulation in Nanostructures / E.Ya. Sherman, Yue Ban, L.V. Gulyaev, D.V. Khomitsky // Journal of Nanoscience and Nanotechnology. – 2012. – V.12. – P.7535.

A11. Khomitsky, D.V. Spin dynamics in a strongly driven system: Very slow Rabi oscillations / D.V. Khomitsky, L.V. Gulyaev, and E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2012. – V.85. – P.125312.

A12. Khomitsky, D.V. Quantum states and linear response in dc and electromagnetic fields for the charge current and spin polarization of electrons at the Bi/Si interface with the giant spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky // $\Im T\Phi$. – 2012. – T.141, BIII.5. – C.848.

A13. Khomitsky, D.V. Spin chaos manifestation in a driven quantum billiard with spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, A.I. Malyshev, E.Ya. Sherman, and M. Di Ventra // Physical Review B. – 2013 – V.88. – P.195407.

A14. Khomitsky, D.V. Edge states and topological properties of electrons on the bismuth on silicon surface with giant spin-orbit coupling / D.V. Khomitsky, A.A. Chubanov // $\Im T\Phi$. – 2014. – T.145, вып.3. – C.525.

A15. Sherman, E.Ya. Spin Dynamics in One-dimensional Semiconductors: Unusual Relaxation and Resonances / E.Ya. Sherman, D.V. Khomitsky, V.K. Dugaev // Chapter 7 in "Advances in Semiconductor Research. Physics of Nanosystems, Spintronic and Technological Applications", Ed. by D. Persano Adorno and S. Pokutnyi, Nova Science Publishers, Inc., New York. – 2015. – 307 P.

A16. Budagosky, J. Shaped electric fields for fast optimal manipulation of electron spin and position in a double quantum dot / J. Budagosky, D.V. Khomitsky, E.Ya. Sherman, A. Castro // Physical Review B. – 2016. – V.93. – P.035423.

A17. Khomitsky, D.V. Regular and irregular dynamics of spin-polarized wavepackets in a mesoscopic quantum dot at the edge of topological insulator / D.V. Khomitsky, A.A. Chubanov, A.A. Konakov // XЭТФ. – 2016. – T.150, вып.6(12). – C.1200.

А18. Хомицкий, Д.В. Релаксация энергии в квантовой точке на краю двумерного топологического изолятора / Д.В. Хомицкий, Е.А. Лаврухина,

А.А. Чубанов, Н. Нжийа // Физика и техника полупроводников. – 2017. – Т.51, вып.11. – С.1557.

А19. Туркевич, Р.В. Динамика электронных состояний и магнитопоглощение в трёхмерных топологических изоляторах в квантующем магнитном поле / Р.В. Туркевич, Д.В. Хомицкий // ЖЭТФ. – 2018. – Т.153, вып.2. – С.283.

A20. Khomitsky, D.V. Electric dipole spin resonance at shallow donors in quantum wires / D.V. Khomitsky, E.A. Lavrukhina, and E.Ya. Sherman // Physical Review B. – 2019. – V.99. – P.014308.

A21. Khomitsky, D.V. Spin Rotation by Resonant Electric Field in Few-Level Quantum Dots: Floquet Dynamics and Tunneling / D.V. Khomitsky, E.A. Lavrukhina, and E.Ya. Sherman // Physical Review Applied. – 2020. – V.14. – P.014090.

A22. Khomitsky, D.V. Connecting the numerical and analytical ionization times for quantum dots in semiconductor wires driven by alternating field / D.V. Khomitsky // Journal of Physics: Conference Series. – 2020 – V.1967. – P.012197.

А23. Хомицкий, Д.В. Спиновый резонанс в квантовой точке на краю топологического изолятора при учёте состояний континуума / Д.В. Хомицкий, К.С. Кабаев, Е.А. Лаврухина // ЖЭТФ. – 2020. – Т.158, вып.5(11). – С.929.

А24. Хомицкий, Д.В. Рассеивание волновых пакетов на поверхности топологических изоляторов в присутствии потенциальных барьеров с намагниченностью / Д.В. Хомицкий, Д.А. Кулаков // ЖЭТФ. – 2020. – Т.157, вып.1. – С.20.

A25. Dorokhin, M.V. Role of resident electrons in the manifestation of a spin polarization memory effect in Mn delta-doped GaAs heterostructures / M.V. Dorokhin, M.V. Ved, P.B. Demina, D.V. Khomitsky, K.S. Kabaev, M.A.G. Balanta, F. Ikawa, B.N. Zvonkov, and N.V. Dikareva // Physical Review B. – 2021. – V.104. – P.125309.

A26. Khomitsky, D.V. Quasistationary states in a quantum dot formed at the edge of topological insulator by magnetic barriers with finite transparency / D.V. Khomitsky and E.A. Lavrukhina // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – V.2103. – P.012201.

A27. Khomitsky, D.V. Formation of bound states from the edge states of 2D topological insulator by macroscopic magnetic barriers / D.V. Khomitsky, A.A. Konakov and E.A. Lavrukhina // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2022. – V.34. – P.405302.

А28. Хомицкий, Д.В. Спин-зависимое туннелирование в двойной квантовой точке в режиме «медленной» эволюции / Д.В. Хомицкий, Н.А. Запруднов // Физика и техника полупроводников. – 2022. – Т.56, вып.10. – С.973.

A29. Khomitsky, D.V. Single-spin Landau-Zener-Stückelberg-Majorana interferometry of Zeeman-split states with strong spin-orbit interaction in a double quantum dot / D.V. Khomitsky and S.A. Studenikin // Physical Review B. – 2022. – V.106. – P.195414.

A30. Khomitsky, D.V. Controllable single-spin evolution at subharmonics of electric dipole spin resonance enhanced by four-level Landau-Zener-Stückelberg-Majorana interference / D.V. Khomitsky, M.V. Bastrakova, V.O. Munyaev, N.A. Zaprudnov, and S.A. Studenikin // Physical Review B. – 2023 – V.108. – P.205404.

А31. Лаврухина, Е.А. Формирование связанных состояний и управление их локализацией в двойной квантовой точке на крае двумерного топологического изолятора с магнитными барьерами / Е.А. Лаврухина, Д.В. Хомицкий, А.В. Тележников // Физика и техника полупроводников.– 2023. – Т.57, вып.7. – С.551.

А32. Хомицкий, Д.В. Расчёт энергетических зон, спиновой поляризации и транспорта в наноструктурах со спин-орбитальным взаимодействием: методические указания к лабораторной работе / Д.В. Хомицкий // Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского. – 2006. – 17 С.

АЗЗ. Хомицкий, Д.В. Физические основы методов управления спиновой плотностью в наноструктурах спинтроники: учебно-методическое пособие / Д.В. Хомицкий // Нижний Новгород: ННГУ им. Н. И. Лобачевского. – 2011. – 94 С.